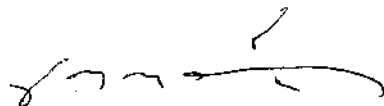


Os Efeitos Negativos do Uso de Ajuste de Quadráticas na Minimização Irrestrita de Funções

Lúcia de Fátima Cétolo

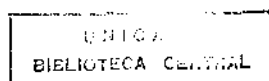
Este exemplar corresponde a redação final da tese devidamente corrigida e defendida pela Srta. Lúcia de Fátima Cétolo e aprovada pela Comissão Julgadora.

Campinas, 24 de Agosto de 1989



Prof. Dr. José Mario Martínez Perez
Orientador

Dissertação apresentada no Instituto de Matemática, Estatística e Ciência da Computação, UNICAMP, como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Matemática Aplicada.



Aos meus pais

Agradecimentos

Ao Professor José Mario Matínez Perez pela orientação.

Ao CNPq e FAPESP pelo apoio financeiro.

Aos colegas, professores e funcionários da UNICAMP, e aos colegas da TELEBRÁS, pela colaboração.

Aos amigos pelo incentivo.

Conteúdo

1	Minimização de funções cuja avaliação está sujeita a erros	2
1.1	Introdução	2
1.2	Descrição do problema	2
1.3	Formulação do problema	3
1.4	Modelo proposto	4
1.5	Ajuste do modelo aos dados disponíveis	4
1.6	Algoritmo proposto para a resolução do problema	5
1.7	Experiências numéricas	5
1.8	A proposta deste trabalho	6
2	Um contra-exemplo	7
2.1	Introdução	7
2.2	Um contra-exemplo	8
2.2.1	Resolução	9
2.2.2	Uma tentativa para melhorar o resultado obtido	10
2.3	Conclusão	11
3	O problema numérico da obtenção da quadrática aproximada	14
3.1	Introdução	14

3.2	Método numérico usado no ajuste	14
3.3	Modo de obtenção da malha de dados	16
3.4	Experiências numéricas com quadráticas sem perturbação .	17
3.4.1	Resultados numéricos obtidos	20
3.4.2	Análise das tabelas	28
3.5	Conclusão	28
4	Experiências numéricas com quadráticas com perturbação	30
4.1	Introdução	30
4.2	Experiências numéricas realizadas	31
4.3	Análise das tabelas	46
4.4	Conclusão	46
5	Experiências numéricas com funções não quadráticas	48
5.1	Introdução	48
5.2	Experiências numéricas realizadas	48
5.3	Análise das tabelas	62
5.4	Conclusão	62
6	Conclusões e comentários	64

Resumo

Este trabalho mostra os efeitos negativos do ajuste de funções quadráticas, quando as mesmas são utilizadas na minimização de funções em que suas primeiras derivadas não estão disponíveis, e a avaliação da função a ser minimizada é obtida experimentalmente, estando portanto, sujeita a erros de medição.

No **capítulo 1** fazemos uma descrição de um método para minimização de funções com as características acima, cuja proposta foi defendida em [6], e consiste do ajuste de uma função quadrática a alguns pontos da função a ser minimizada e minimização da quadrática aproximada.

No **capítulo 2** apresentamos um contra-exemplo mostrando os efeitos negativos na abordagem do método proposto em [6].

No **capítulo 3** formulamos o problema de maneira genérica e apresentamos as experiências realizadas com funções quadráticas como funções teste, na intenção de mostrar a confiabilidade do modelo em estudo.

Com o intuito de realizar experiências com funções teste próximas da realidade, ou seja, funções com avaliação contendo certo erro de medição, realizamos no **capítulo 4** experiências com funções quadráticas com perturbação.

Finalmente, apresentamos no **capítulo 5** as experiências numéricas realizadas com funções não quadráticas encontradas na literatura [8], visando aproximar o modelo ainda mais da realidade.

Capítulo 1

Minimização de funções cuja avaliação está sujeita a erros

1.1 Introdução

Neste capítulo apresentamos um problema de otimização não linear que foi motivado pelo projeto de um difusor contínuo para a extração de sacarose da cana de açúcar, cujo enfoque é dado por [6].

No processo de difusão, a eficiência (percentual de extração de sacarose) depende de valores atribuídos às variáveis envolvidas no processo; o problema consiste em encontrar valores apropriados para estas variáveis, de modo a obter uma extração bastante eficiente de sacarose, pelo processo de difusão, no menor número de ensaios possível.

Em [6] foi proposto um algoritmo para a resolução deste problema; neste trabalho apresentamos o problema como sendo de caráter geral, sendo que ele pode ser estendido a qualquer processo experimental, assim como o algoritmo para a sua resolução, admitindo desta forma qualquer número de variáveis que intervêm no suposto processo experimental.

1.2 Descrição do problema

Genericamente, o problema apresentado consiste na minimização de funções de várias variáveis, possuindo as seguintes características:

1. Suas derivadas não estão disponíveis.

2. A avaliação da função não é dada de maneira determinística (através de expressão analítica definida), mas através de processo experimental observável, estando portanto sujeita a erros aleatórios de medição ou erros causados pela omissão de certas variáveis que intervêm no processo.
3. O custo para avaliar a função, ou seja, o custo da realização do processo, é muito alto.

1.3 Formulação do problema

Num processo experimental pode ocorrer a existência de variáveis independentes contínuas e discretas. Arranjando-se adequadamente combinações das variáveis discretas em conjuntos, tem-se definido, para cada um desses conjuntos, um problema de otimização “contínuo”.

Sejam x_1, \dots, x_n variáveis independentes contínuas e y o valor obtido através de processo experimental observável para valores dados a x_1, \dots, x_n , distribuídos da seguinte maneira:

Obs	x_1	x_2	...	x_n	y
1	x_1^1	x_2^1	...	x_n^1	y^1
2	x_1^2	x_2^2	...	x_n^2	y^2
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots
m	x_1^m	x_2^m	...	x_n^m	y^m

onde:

- m é o número de experimentos observáveis;
- y^j é a variável dependente, $j = 1, \dots, m$ e representa o valor obtido para a função objetivo no experimento j ;
- x_i^j é a variável independente e representa as variáveis contínuas usadas no experimento j , $i = 1, \dots, n$, $j = 1, \dots, m$.

O problema se resume em encontrar valores de x_1, \dots, x_n , que forneçam um valor ótimo da “função” em questão, no menor número de ensaios possível, dado que o custo de cada ensaio é alto.

1.4 Modelo proposto

Em [6] é proposto que funções como as descritas anteriormente são representadas de maneira adequada pelo modelo quadrático seguinte:

$$\text{"valor da função"} = Q(x) = \frac{1}{2}x'Gx + b'x + c$$

onde:

- G é uma matriz simétrica ($n \times n$)
- b é um vetor (n)
- c é uma constante
- x é o vetor das variáveis independentes.

G , b e c são determinados em cada passo do algoritmo usando todos os ensaios precedentes, através do método dos quadrados mínimos lineares.

Argumenta-se em [6] que a escolha do modelo é razoável, visto que as expressões quadráticas são as que melhor se adaptam a problemas de otimização.

1.5 Ajuste do modelo aos dados disponíveis

Dado um conjunto de m pares de valores $(x^1, y^1), (x^2, y^2), \dots, (x^m, y^m)$

onde:

- $x^i \in \mathbb{R}^n$ (vetor das variáveis independentes)
- $y^i \in \mathbb{R}$ (variável dependente),

o modelo quadrático descrito deve ser ajustado aos dados disponíveis, de maneira que o erro obtido no ajuste seja mínimo.

Para se encontrar a melhor aproximação quadrática é necessário achar os coeficientes de G , b e c que minimizem a seguinte expressão:

$$\sum_{i=1}^m [y^i - (\frac{1}{2}(x^i)^t G x^i + b^t x^i + c)]^2 \quad (1.1)$$

Este problema pode ser resolvido pelo método dos quadrados mínimos lineares [11].

1.6 Algoritmo proposto para a resolução do problema

Em [6] é proposto um método de resolução que consiste nos seguintes passos:

Inicialmente simula-se um número de experimentos, atribuindo valores gerados aleatoriamente para as variáveis independentes e calculando o valor da variável dependente para cada experimento.

A seguir executam-se os seguintes passos:

1. Ajusta-se o modelo quadrático $Q(x)$ aos pontos gerados, através do método dos quadrados mínimos lineares;
2. Minimiza-se $Q(x)$, encontrando o ponto ótimo x^* ;
3. Simula-se um novo experimento, calculando o valor da função em x^* e encontrando o ponto (x^*, y^*) ;
4. Ajusta-se a nova quadrática, incluindo neste ajuste o ponto (x^*, y^*) ;
5. Minimiza-se a nova quadrática encontrada em 4.;
6. Repete-se o processo até que seja atingido um valor razoável para a variável dependente.

Para a otimização da função quadrática nos itens 2. e 5. pode-se usar qualquer método de otimização.

1.7 Experiências numéricas

Por ser onerosa a realização de processos experimentais práticos, é muito comum a utilização de funções teste na análise do comportamento de um algoritmo, para a simulação de valores da variável dependente.

Para analisar o comportamento do algoritmo proposto, foram realizadas experiências numéricas em [6] com a seguinte função teste:

$$F(x) = (x - x^*)^t G(x - x^*) + c + P \quad (1.2)$$

Onde:

- x^* é um suposto ponto ótimo
- x é o vetor das variáveis independentes
- G é uma matriz simétrica
- c é uma constante
- P é uma perturbação aleatória.

O valor da perturbação P faz com que a avaliação de $F(x)$ fique sujeita a erros, simulando desta maneira valores obtidos através de processo experimental observável.

Para efeito de análise, levou-se em consideração o número de avaliações da função, representando o número de experimentos que é necessário realizar até ser atingido um valor mínimo da função objetivo em questão.

Foram realizados testes (num número limitado) com o algoritmo proposto e com o algoritmo de Nelder-Mead [7], variando a perturbação aplicada à função teste de zero a 100%.

As experiências numéricas realizadas em [6] mostraram que o algoritmo proposto é melhor que o algoritmo de Nelder-Mead quanto ao número de avaliações da função objetivo em teste, qualquer que tenha sido o valor atribuído à perturbação.

1.8 A proposta deste trabalho

As experiências numéricas realizadas em [6] mostram a eficiência do algoritmo proposto; porém, tendo sido realizado um número limitado de testes, propomos neste trabalho testar o algoritmo exaustivamente, variando alternativas.

Capítulo 2

Um contra-exemplo

2.1 Introdução

A validade da proposta de [6] depende de um fato essencial: - é possível estimar boas aproximações quadráticas de funções arbitrárias usando somente valores da função? Em particular, funções convexas geram sempre aproximações quadráticas convexas?

Para a obtenção de bons resultados na minimização de funções convexas usando o algoritmo proposto é fundamental que a quadrática aproximada também seja convexa. Neste caso é viável a minimização da mesma numa tentativa de busca do ponto de mínimo da função original.

Se, ao contrário, a quadrática aproximada não for convexa, torna-se impossível uma minimização irrestrita segundo a proposta de [6]. (o mínimo neste caso tende a $-\infty$). Uma solução para este tipo de problema seria uma minimização com as variáveis independentes sujeitas a restrições canalizadas. Entretanto, o mínimo estaria sempre no limite da canalização (cujos valores seriam especificados de acordo com um critério próprio). Assim, este ponto de mínimo encontrado pode não estar próximo do mínimo da função convexa original.

Uma questão relacionada é: - existe uma proximidade entre a quadrática obtida e a função convexa original?

É fato que o mínimo da função quadrática só estará perto do mínimo da função convexa original se as duas estiverem razoavelmente próximas uma da outra.

2.2 Um contra-exemplo

A seguir apresentamos um contra-exemplo que mostra de maneira muito clara certas dificuldades na abordagem de [6].

Consideremos a seguinte função em \mathbb{R}^2 :

$$F(x) = \frac{|x_1|^P + |x_2|^P}{2}, \quad P = \frac{\ln 3}{\ln 2} = \log_2 3 \quad (2.1)$$

Podemos verificar facilmente que $F(x)$ é uma função convexa (vide figura 2.1).

Com a intenção de mostrar certos resultados no ajuste, conforme exposição anterior, o modelo quadrático do item 1.4:

$$Q(x) = \frac{1}{2}x'Gx + b'x + c$$

será ajustado a alguns pontos da função 2.1.

Uma breve descrição do modelo utilizado é feita a seguir.

Definimos:

- $G \triangleq \begin{bmatrix} h_{11} & h_{12} \\ h_{12} & h_{22} \end{bmatrix},$
- $x \triangleq \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix},$
- $b \triangleq \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \end{bmatrix}.$

Assim sendo,

$$Q(x) = \frac{1}{2}x_1^2h_{11} + x_1x_2h_{12} + \frac{1}{2}x_2^2h_{22} + x_1b_1 + x_2b_2 + c \quad (2.2)$$

Selecionamos os seguintes pontos ($\in \mathbb{R}^2$) a serem usados no ajuste:

x	$F(x)$
$(\epsilon, 2\epsilon)$	$2\epsilon^P$
$(2\epsilon, \epsilon)$	$2\epsilon^P$
$(-\epsilon, -\epsilon)$	ϵ^P
$(0, 0)$	0
$(-2\epsilon, -\epsilon)$	$2\epsilon^P$
$(-\epsilon, -2\epsilon)$	$2\epsilon^P$

com $\epsilon > 0$, sendo que ϵ mede a proximidade entre os pontos escolhidos.

2.2.1 Resolução

O seguinte sistema de equações lineares é obtido aplicando-se a equação 2.2 a cada ponto da malha de dados acima:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\epsilon^2}{2} h_{11} + 2\epsilon^2 h_{12} + 2\epsilon^2 h_{22} + \epsilon b_1 + 2\epsilon b_2 + c = 2\epsilon^P \\ 2\epsilon^2 h_{11} + 2\epsilon^2 h_{12} + \frac{\epsilon^2}{2} h_{22} + 2\epsilon b_1 + \epsilon b_2 + c = 2\epsilon^P \\ \frac{\epsilon^2}{2} h_{11} + \epsilon^2 h_{12} + \frac{\epsilon^2}{2} h_{22} - \epsilon b_1 - \epsilon b_2 + c = \epsilon^P \\ c = 0 \\ 2\epsilon^2 h_{11} + 2\epsilon^2 h_{12} + \frac{\epsilon^2}{2} h_{22} - 2\epsilon b_1 - \epsilon b_2 + c = 2\epsilon^P \\ \frac{\epsilon^2}{2} h_{11} + 2\epsilon^2 h_{12} + 2\epsilon^2 h_{22} - \epsilon b_1 - 2\epsilon b_2 + c = 2\epsilon^P \end{array} \right.$$

Este sistema de equações lineares pode ser resolvido pelo processo de triangularização de Gauss, como segue:

$$\left[\begin{array}{ccccccc} \frac{1}{2}\epsilon^2 & 2\epsilon^2 & 2\epsilon^2 & \epsilon & 2\epsilon & 1 & 2\epsilon^P \\ 2\epsilon^2 & 2\epsilon^2 & \frac{1}{2}\epsilon^2 & 2\epsilon & \epsilon & 1 & 2\epsilon^P \\ \frac{1}{2}\epsilon^2 & \epsilon^2 & \frac{1}{2}\epsilon^2 & -\epsilon & -\epsilon & 1 & \epsilon^P \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 2\epsilon^2 & 2\epsilon^2 & \frac{1}{2}\epsilon^2 & -2\epsilon & -\epsilon & 1 & 2\epsilon^P \\ \frac{1}{2}\epsilon^2 & 2\epsilon^2 & 2\epsilon^2 & -\epsilon & -2\epsilon & 1 & 2\epsilon^P \end{array} \right] \simeq$$

$$\left[\begin{array}{ccccccc} 2\epsilon^2 & 2\epsilon^2 & \frac{1}{2}\epsilon^2 & 2\epsilon & \epsilon & 1 & 2\epsilon^P \\ 0 & \frac{3}{2}\epsilon^2 & \frac{15}{8}\epsilon^2 & \frac{1}{2}\epsilon & \frac{7}{4}\epsilon & \frac{3}{4} & \frac{3}{2}\epsilon^P \\ 0 & \frac{1}{2}\epsilon^2 & \frac{3}{8}\epsilon^2 & -\frac{3}{2}\epsilon & -\frac{5}{4}\epsilon & \frac{3}{4} & \frac{1}{2}\epsilon^P \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -4\epsilon & -2\epsilon & 0 & 0 \\ 0 & \frac{3}{2}\epsilon^2 & \frac{15}{8}\epsilon^2 & -\frac{3}{2}\epsilon & -\frac{9}{4}\epsilon & \frac{3}{4} & \frac{3}{2}\epsilon^P \end{array} \right] \simeq$$

$$\left[\begin{array}{ccccccc} 2\epsilon^2 & 2\epsilon^2 & \frac{1}{2}\epsilon^2 & 2\epsilon & \epsilon & 1 & 2\epsilon^P \\ 0 & \frac{3}{2}\epsilon^2 & \frac{15}{8}\epsilon^2 & \frac{1}{2}\epsilon & \frac{7}{4}\epsilon & \frac{3}{4} & \frac{3}{2}\epsilon^P \\ 0 & 0 & -\frac{1}{4}\epsilon^2 & -\frac{5}{3}\epsilon & -\frac{11}{6}\epsilon & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -4\epsilon & -2\epsilon & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -2\epsilon & -4\epsilon & 0 & 0 \end{array} \right] \simeq$$

$$\begin{bmatrix} 2\epsilon^2 & 2\epsilon^2 & \frac{1}{2}\epsilon^2 & 2\epsilon & \epsilon & 1 & 2\epsilon^P \\ 0 & \frac{3}{2}\epsilon^2 & \frac{15}{8}\epsilon^2 & \frac{1}{2}\epsilon & \frac{7}{4}\epsilon & \frac{3}{4} & \frac{3}{2}\epsilon^P \\ 0 & 0 & -\frac{1}{4}\epsilon^2 & -\frac{5}{3}\epsilon & -\frac{11}{6}\epsilon & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -4\epsilon & -2\epsilon & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -3\epsilon & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

Deste modo:

$$h_{11} = 0, h_{12} = \epsilon^{P-2}, h_{22} = 0, b_1 = 0, b_2 = 0, c = 0$$

ou seja:

$$Q(x) = \epsilon^{P-2}x_1x_2 \quad (2.3)$$

Podemos verificar que a quadrática ajustada é *não convexa* qualquer que seja a proximidade entre os pontos usados no ajuste.

Em particular, quando $\epsilon = 1$, a quadrática ajustada é:

$$Q(x) = x_1x_2 \quad (2.4)$$

que certamente é não convexa (vide figura 2.2).

O maior problema encontrado é, portanto, o ajuste de uma função quadrática não convexa, uma vez que isto torna o processo de minimização impraticável, conforme argumentamos no item 2.1.

2.2.2 Uma tentativa para melhorar o resultado obtido

Até então o ajuste foi feito com a malha de dados possuindo um número de pontos igual ao número de incógnitas do modelo ajustado. Porém, a quadrática 2.3 que foi aproximada aos pontos da malha em questão é não convexa.

Uma tentativa para a obtenção de uma função quadrática convexa é acrescentar alguns pontos à malha até então considerada e resolver um sistema sobredeterminado de equações lineares através do método dos quadrados mínimos lineares. Esta escolha é razoável, uma vez que o método

dos quadrados mínimos lineares possui um efeito suavizador que reduz a influência de algum ponto no valor do ajuste. Assim sendo, esperamos que o uso de quadrados mínimos leve a uma melhor aproximação da função objetivo original, ou seja, que produza um modelo mais representativo da mesma.

De fato, acrescentando os pontos (aleatórios):

$$(1.195, 2.732) \text{ e } (1.609, 2.322)$$

à malha de dados atual (com $\epsilon = 1$), e resolvendo computacionalmente o sistema sobredeterminado de equações lineares, obtivemos a seguinte função quadrática:

$$\begin{aligned} Q'(x) = & 0.3243997x_1^2 + 0.1420100x_1x_2 + 0.2989851x_2^2 + \\ & 0.0130169x_1 - 0.0452041x_2 + 0.1210747 \end{aligned} \quad (2.5)$$

Verifica-se facilmente que a quadrática 2.5 é convexa (vide figura 2.3).

Tomando como base a experiência numérica realizada, é provável que um melhor ajuste pode ser obtido quando o número de pontos usados no mesmo for maior que o número de incógnitas do modelo.

2.3 Conclusão

O exemplo apresentado mostra que o ajuste de um modelo quadrático aos pontos de uma função original convexa pode produzir uma função quadrática não convexa. Este problema é muito grave, visto que o modelo proposto só pode ser usado se a quadrática ajustada for convexa.

No entanto, acrescentando-se alguns pontos a essa mesma malha de dados, de modo que o número de pontos da mesma seja maior que o número de incógnitas do modelo, a quadrática ajustada pode resultar convexa.

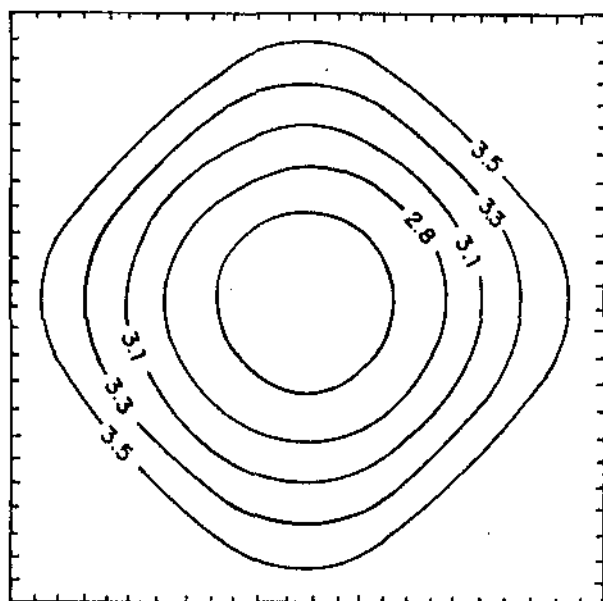


Figura 2.1: Curvas de nível de $F(x)$

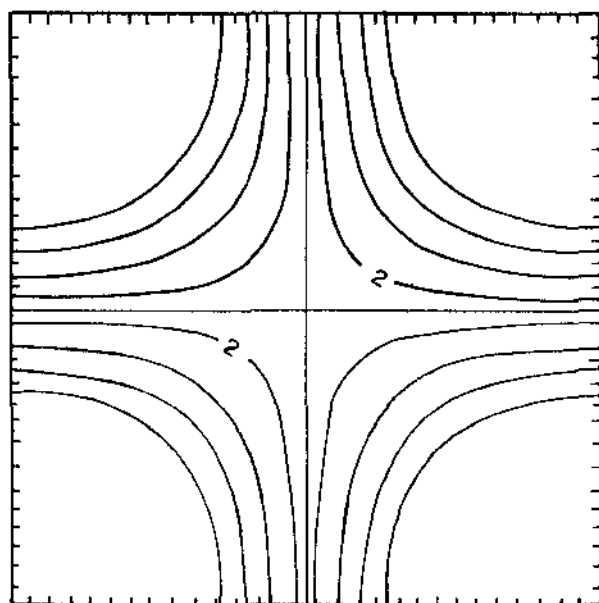


Figura 2.2: Curvas de nível de $Q(x)$

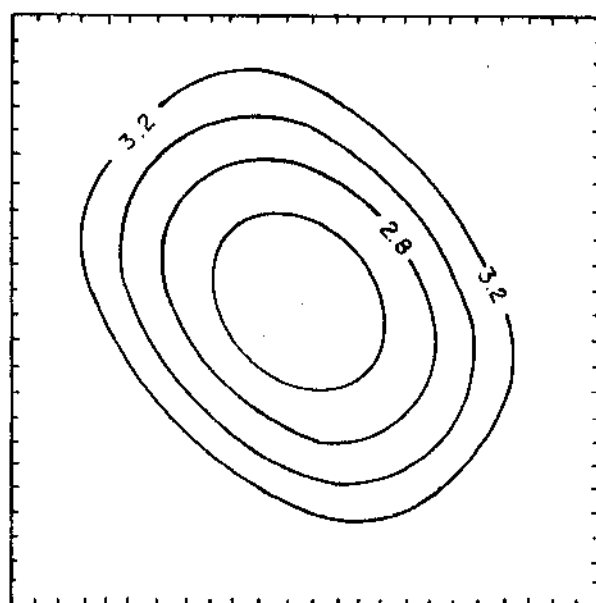


Figura 2.3: Curvas de nível de $Q'(x)$

Capítulo 3

O problema numérico da obtenção da quadrática aproximada

3.1 Introdução

Com base no exemplo do capítulo anterior conjecturamos que ajustando a função por uma quantidade suficientemente grande de pontos a uma quadrática, conseguiremos aproximações razoáveis. Em particular, isto deveria acontecer no caso (irreal) em que a função original é uma quadrática sem ruído.

Naturalmente, do ponto de vista analítico não há nada para testar porque a quadrática ajustada será a mesma que a original. Porém, mostramos neste capítulo, com este tipo de exemplo, que o método usado no ajuste é confiável; ou seja, que se em experiências mais realistas (não quadráticas) os resultados não forem satisfatórios, isto não deve ser atribuído aos algoritmos usados.

3.2 Método numérico usado no ajuste

Seja uma função analítica $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ e $f(x^i)$ o valor da função no ponto x^i para $i = 1, \dots, M$. Ao conjunto de valores $(x^i, f(x^i))$, $i = 1, \dots, M$ chamamos de *malha de dados*.

Nosso propósito é ajustar os pontos desta malha de dados ao modelo

quadrático:

$$Q(x) = \frac{1}{2}x^T Gx + b^t x + c \quad (3.1)$$

onde:

- G é uma matriz simétrica $n \times n$,
- b é um vetor de dimensão n ,
- c é uma constante.

Devemos estimar os coeficientes de G , b e c . Para isso usamos o seguinte modelo interpolador:

$$f(x) = \frac{1}{2}x^t Gx + b^t x + c \quad (3.2)$$

Sejam:

- $G = \begin{bmatrix} g_{11} & \dots & g_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ g_{1n} & \dots & g_{nn} \end{bmatrix},$
- $b = \begin{bmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix},$
- $x = \begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}.$

O modelo definido pela equação 3.2 acima pode ser expresso como:

$$Y\alpha = V \quad (3.3)$$

onde:

$$Y \triangleq \begin{bmatrix} y^t(x^1) \\ \vdots \\ y^t(x^M) \end{bmatrix}, \quad V \triangleq \begin{bmatrix} f(x^1) \\ \vdots \\ f(x^M) \end{bmatrix},$$

$$y(x) \triangleq \begin{bmatrix} \frac{1}{2}(x_1)^2 \\ \vdots \\ \frac{1}{2}(x_n)^2 \\ x_1x_2 \\ x_2x_3 \\ \vdots \\ x_{n-1}x_n \\ x_1 \\ \vdots \\ x_n \\ 1 \end{bmatrix}, \quad \alpha \triangleq \begin{bmatrix} g_{11} \\ \vdots \\ g_{nn} \\ g_{12} \\ \vdots \\ g_{1n} \\ g_{23} \\ \vdots \\ g_{2n} \\ \vdots \\ g_{n-1,n} \\ b_1 \\ \vdots \\ b_n \\ c \end{bmatrix}$$

Neste modelo, o número de incógnitas é:

$$N = \frac{(n+1)(n+2)}{2} \quad (3.4)$$

Quando $N = M$ a malha é dita ser *exata*. Neste caso as incógnitas são estimadas resolvendo-se um sistema de N equações lineares. Quando $M > N$ a malha é dita ser *sobredeterminada*, e os coeficientes podem ser estimados através de quadrados mínimos lineares.

3.3 Modo de obtenção da malha de dados

Os pontos da malha de dados a ser usada no ajuste podem ser obtidos de diferentes maneiras. Uma exigência na escolha é que a função analítica esteja avaliada no ponto escolhido. De um modo geral, é dado um ponto e os demais são gerados aleatoriamente através de determinadas regras que permitem uma distribuição dos pontos numa região próxima ao ponto dado.

Sejam:

- P_0 um ponto dado tal que $P_0 = (x_{01}, \dots, x_{0n})$,
- r um número aleatório tal que $0 \leq r \leq 1$,
- Δ uma medida da proximidade entre os pontos da malha.

Neste trabalho consideramos os seguintes modos de obtenção dos $M - 1$ pontos restantes da malha:

1. **Modo 1** - Os pontos são gerados aleatoriamente ao redor do ponto dado P_0 segundo a regra:

$$P_i = P_0 + 2(r - 0.5)\Delta, \quad i = 1, \dots, M - 1$$

(vide figura 3.1).

2. **Modo 2** - Pontos obtidos do *Simplex* de dimensão n formado nas coordenadas de acordo com [7], da seguinte maneira:

$$P_i = (x_{01}, x_{02}, \dots, y_i, x_{0,i+1}, \dots, x_{0n})$$

com $y_i = x_{0i} + r\Delta$, $i = 1, \dots, n$.

Os demais pontos são obtidos tomando a mediana entre os n pontos:

$$P_{ij} = \frac{(P_i + P_j)}{2}, \quad i \neq j$$

totalizando assim $\frac{(n+1)(n+2)}{2}$ pontos (vide figura 3.2).

3. **Modo 3** - Pontos gerados aleatoriamente no espaço entre os eixos positivos das coordenadas originárias no ponto dado P_0 , ou seja:

$$P_i = P_0 + r\Delta, \quad i = 1, \dots, M - 1$$

(vide figura 3.3).

4. **Modo 4** - Pontos gerados aleatoriamente no espaço entre os eixos positivos e entre os eixos negativos das coordenadas originárias no ponto dado P_0 , ou seja:

$$P_i = P_0 \pm r\Delta, \quad i = 1, \dots, M - 1$$

(vide figura 3.4).

3.4 Experiências numéricas com quadráticas sem perturbação

Com o intuito de mostrar que o modelo descrito no item 3.2 é confiável, realizamos experiências numéricas onde a função analítica original a ser

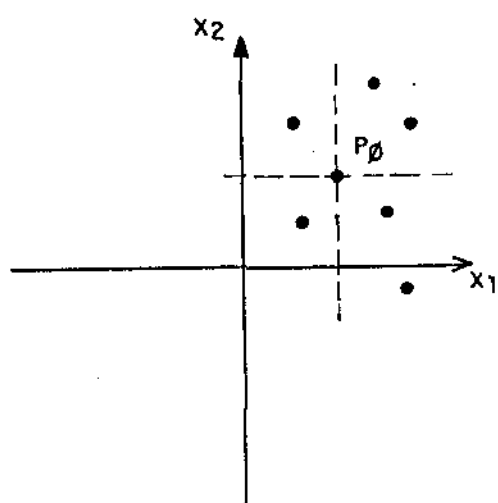


Figura 3.1: Pontos gerados segundo o modo 1

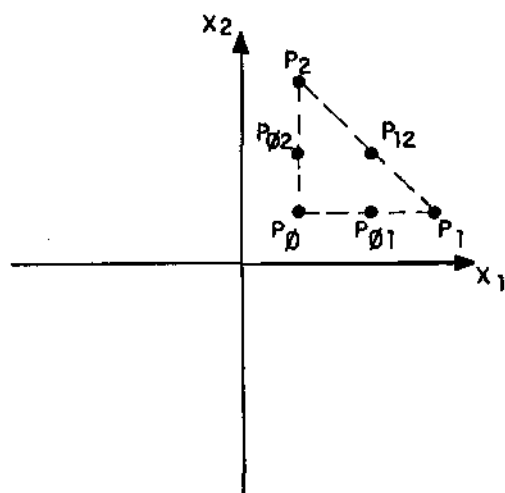


Figura 3.2: Pontos gerados segundo o modo 2

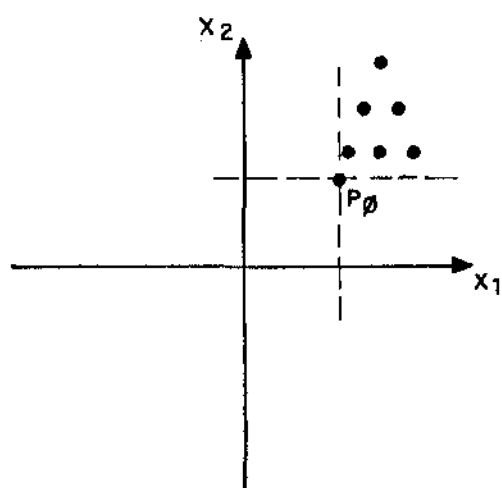


Figura 3.3: Pontos gerados segundo o modo 3

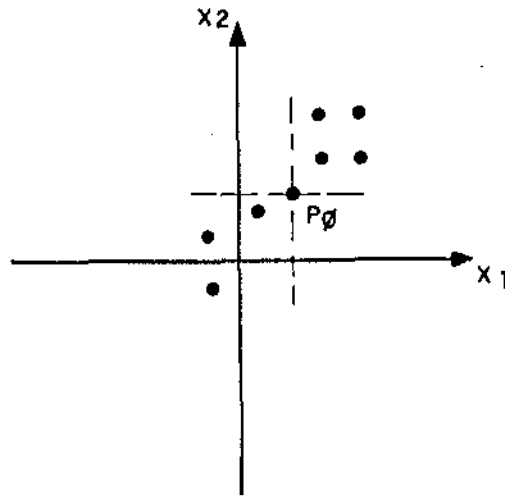


Figura 3.4: Pontos gerados segundo o modo 4

usada no ajuste é uma função quadrática sem perturbação. Neste caso espera-se que a quadrática ajustada seja a mesma que a original.

O método usado foi implementado em linguagem de programação FORTRAN, utilizando a rotina MINOR [4] na resolução do sistema de equações lineares.

A quadrática ajustada foi comparada com a quadrática original através da distância suprema entre as suas respectivas hessianas; a convexidade da quadrática ajustada foi verificada através do cálculo dos autovalores de sua matriz hessiana, sendo utilizada para isto a rotina EIGEN [9].

O ajuste foi feito de maneira exaustiva, variando os seguintes parâmetros:

- O modo de obtenção da malha de dados;
- A distância entre os pontos da malha (Δ);
- O número de pontos pertencentes à malha de dados (M).

As seguintes funções quadráticas foram usadas no ajuste:

1. $f(x) = (x_1 - 2)^2 + (x_2 - 3)^2$
2. $f(x) = 2x_1^2 + x_2^2 + x_1x_2 + 2x_1$
3. $f(x) = (2x_1 - x_2)^2 + (x_3 - 200)^2$

Estas funções foram escolhidas levando-se em conta a convexidade de cada uma delas, sendo que as funções 1 e 2 são estritamente convexas, e a função 3 é convexa não estrita.

Para cada função acima foram escolhidos um ou mais *pontos dados* a serem usados em cada experimento, conforme vemos adiante.

3.4.1 Resultados numéricos obtidos

As tabelas a seguir mostram os resultados das experiências numéricas realizadas. Cada tabela mostra a distância suprema entre as hessianas da quadrática ajustada e da quadrática original para uma função e um ponto dado que foi escolhido aleatoriamente. A cada distância suprema apresentada, corresponde um ajuste realizado.

Além disto, as tabelas destacam os ajustes que produziram funções quadráticas *não convexas*, e os ajustes que produziram quadráticas a partir de matriz *mal condicionada*¹.

A seguir são apresentadas as tabelas.

¹O mal condicionamento de uma matriz está relacionado com a proximidade da mesma de ser singular.

TABELA 3.1 - Distância suprema entre as hessianas da quadrática ajustada e da função original

Função original: $f(x) = (x_1 - 2)^2 + (x_2 - 3)^2$

Ponto dado: (2, 3)

MODO 1				
M	$\Delta = 1$	$\Delta = 0.1$	$\Delta = 0.01$	$\Delta = 0.001$
6	0.5574524E-04	0.2309442E-02	0.3431946	1.449726 *†
7	0.1072884E-05	0.9743869E-04	0.1003504E-01	2.187520 *†
8	0.3874302E-06	0.8568168E-04	0.3256932E-02	0.2146434
9	0.1132488E-05	0.3039837E-04	0.3331274E-02	0.7876599
10	0.5662441E-06	0.3594160E-04	0.3970563E-02	0.4013228
11	0.3278255E-06	0.3276765E-04	0.1398692E-01	0.4049288
12	0.2549139E-06	0.1395792E-03	0.9409666E-02	0.4954362
MODO 2				
M	$\Delta = 1$	$\Delta = 0.1$	$\Delta = 0.01$	$\Delta = 0.001$
6	0.1430511E-05	0.1357550E-03	0.5794726E-02	1.350761 *†
7	0.1564622E-05	0.1476407E-03	0.2610255E-01	1.705608 *†
8	0.3110408E-05	0.1708567E-03	0.3918621E-01	2.008690 *†
9	0.2980232E-05	0.3413558E-03	0.5961975E-01	1.837578 *†
10	0.4008412E-05	0.5714744E-03	0.4536456E-01	1.998203 *†
11	0.8046627E-05	0.2514612E-03	0.2402672E-01	2.094537 *†
12	0.1847744E-05	0.2289712E-03	0.4469163E-01	2.125937 *†
MODO 3				
M	$\Delta = 1$	$\Delta = 0.1$	$\Delta = 0.01$	$\Delta = 0.001$
6	0.2228349E-04	0.1803652E-02	0.8097476E-01	2.137002 *†
7	0.4927553E-05	0.1011463E-02	0.4349393E-01	1.662537
8	0.1087785E-05	0.5322433E-03	0.3389364E-01	1.733942
9	0.2111573E-05	0.1606819E-03	0.2270712E-01	1.804926
10	0.2316266E-05	0.4947733E-03	0.3433081E-01	2.055234
11	0.8344650E-06	0.2052131E-03	0.7515196E-02	2.295557 *†
12	0.3057431E-05	0.7460189E-04	0.1459409E-01	2.413924 *†
MODO 4				
M	$\Delta = 1$	$\Delta = 0.1$	$\Delta = 0.01$	$\Delta = 0.001$
6	0.4127622E-05	0.3709942E-03	0.4786351E-01	1.541012 *†
7	0.3561378E-05	0.5075783E-03	0.3370246E-01	1.793502 †
8	0.3591180E-05	0.2891123E-03	0.3250450E-01	1.766173 †
9	0.7218667E-06	0.7888079E-03	0.6658389E-02	1.783976 *†
10	0.1981854E-05	0.8394046E-04	0.9034047E-01	1.647559 *†
11	0.1952052E-05	0.7704082E-04	0.1372292	1.548026 †
12	0.2175570E-05	0.5359948E-03	0.2951522E-01	1.591611 †

* Quadrática ajustada não convexa

† Matriz do sistema de equações mal condicionada

TABELA 3.2 - Distância suprema entre as hessianas da quadrática ajustada e da função original

Função original: $f(x) = (x_1 - 2)^2 + (x_2 - 3)^2$

Ponto dado: (1,60)

MODO 1				
M	$\Delta = 10$	$\Delta = 1$	$\Delta = 0.1$	$\Delta = 0.01$
6	0.1542568E-03	0.6147385E-02	0.2270019	3.544980 †
7	0.4410744E-05	0.1029372E-03	0.9866327E-02	1.091822 †
8	0.3457069E-05	0.4056096E-04	0.1273349E-02	0.4630360 †
9	0.8791685E-06	0.1311898E-03	0.2313036E-02	0.5569437 †
10	0.1564622E-05	0.1320839E-03	0.7354319E-03	0.4984835 †
11	0.7748604E-06	0.8152425E-04	0.7814243E-02	0.8084793
12	0.7897615E-06	0.4541874E-04	0.3557026E-02	0.4550230
MODO 2				
M	$\Delta = 10$	$\Delta = 1$	$\Delta = 0.1$	$\Delta = 0.01$
6	0.2875924E-05	0.3991723E-03	0.3513479E-01	2.675825 †
7	0.3278255E-06	0.2056062E-03	0.2050120E-01	3.782010 †
8	0.6167324E-05	0.1155047E-03	0.2017099E-01	1.618390 †
9	0.3300056E-05	0.3669858E-03	0.2889651E-01	2.084454 †
10	0.4380941E-05	0.1493615E-03	0.5958083E-01	2.091431
11	0.1251698E-05	0.5939603E-03	0.6221393E-01	2.136385
12	0.2682209E-05	0.6242096E-03	0.1078062	2.125132
MODO 3				
M	$\Delta = 10$	$\Delta = 1$	$\Delta = 0.1$	$\Delta = 0.01$
6	0.8045904E-05	0.1219860E-02	0.2743963	15.67518 *†
7	0.1766491E-04	0.4748183E-03	0.3203487E-01	5.697177 *†
8	0.9022938E-05	0.3177334E-03	0.2208713E-01	3.009755 *
9	0.1097579E-04	0.1014911E-02	0.7630065E-01	3.703015 *†
10	0.1106093E-04	0.1191977E-03	0.4477612E-01	2.813076 *
11	0.6189768E-05	0.9333181E-04	0.1671913E-01	1.496793
12	0.9126259E-05	0.7358733E-03	0.5320223E-01	0.8163667
MODO 4				
M	$\Delta = 10$	$\Delta = 1$	$\Delta = 0.1$	$\Delta = 0.01$
6	0.8910894E-05	0.5065799E-03	0.3812085E-01	17.86018 †
7	0.4500151E-05	0.4120618E-03	0.1346707	5.974771 †
8	0.1299381E-04	0.1929556E-03	0.5600411E-01	3.782889 †
9	0.2458692E-05	0.1327038E-02	0.1130924	5.483113
10	0.4634261E-05	0.9446442E-03	0.1024837	7.764077 †
11	0.1344085E-04	0.2757013E-03	0.6465541E-01	5.672014
12	0.1448393E-04	0.7565618E-03	0.1136916	4.362696

* Quadrática ajustada não convexa

† Matriz do sistema de equações mal condicionada

TABELA 3.3 - Distância suprema entre as hessianas da quadrática ajustada e da função original

Função original: $f(x) = (x_1 - 2)^2 + (x_2 - 3)^2$

Ponto dado: $(-98, 103)$

MODO 1				
M	$\Delta = 10$	$\Delta = 1$	$\Delta = 0.1$	$\Delta = 0.01$
6	0.1256466E-03	0.5816489E-02	0.1438801 †	1.389209 †
7	0.7480383E-05	0.1318127E-02	0.5167991E-01	0.2367215 †
8	0.6720424E-05	0.7498860E-03	0.1267511	0.8298112 *†
9	0.7629395E-05	0.5993098E-03	0.5082576E-01	2.596527 †
10	0.4634261E-05	0.5537868E-03	0.1971498E-01	0.8746351 †
11	0.1356006E-03	0.2985746E-03	0.8832857E-01	1.161070 †
12	0.7733703E-05	0.2124608E-03	0.1346343	0.1681154 †
MODO 2				
M	$\Delta = 10$	$\Delta = 1$	$\Delta = 0.1$	$\Delta = 0.01$
6	0.3489852E-04	0.6405346E-03	0.3143635	1.348714 †
7	0.2259016E-04	0.3474563E-02	0.2450978	0.6361692 †
8	0.2139620E-04	0.3556922E-02	0.9426959E-01	3.403299 *†
9	0.1360216E-04	0.2324075E-02	0.4369492	4.146541 *†
10	0.2068281E-04	0.4662216E-02	0.3159769	0.9225506 †
11	0.1955032E-04	0.6155759E-02	0.1117373	1.346763 *†
12	0.6452203E-05	0.4407004E-02	0.1446025	0.5963551 †
MODO 3				
M	$\Delta = 10$	$\Delta = 1$	$\Delta = 0.1$	$\Delta = 0.01$
6	0.1749195E-03	0.8722278E-03	0.1283995	0.3536430 †
7	0.3678445E-04	0.6960061E-02	0.2011699	3.027874 *†
8	0.5917229E-04	0.1832634E-02	0.3177830	0.435600 †
9	0.7297954E-04	0.6111831E-03	0.1657759	1.994717 *†
10	0.2211971E-04	0.1181216E-02	0.1915766	4.135437 *†
11	0.7648718E-05	0.2394915E-03	0.2595810	2.195526 *†
12	0.2664487E-04	0.4687896E-03	0.1644924	1.685925 *†
MODO 4				
M	$\Delta = 10$	$\Delta = 1$	$\Delta = 0.1$	$\Delta = 0.01$
6	0.1060516E-03	0.9540856E-02	1.125898	1.350212 *†
7	0.8045137E-04	0.7732302E-02	0.5837619	2.352585 *†
8	0.5243719E-04	0.2369612E-02	0.3733679	1.133516 *†
9	0.1519918E-04	0.2733231E-02	0.4036065	1.249408 *†
10	0.1028180E-04	0.3041804E-02	0.1994955	4.122038 *†
11	0.4267693E-04	0.1095915E-01	0.6540912E-01	3.017571 *†
12	0.5400181E-04	0.4975051E-02	0.2011712	2.003955 *†

* Quadrática ajustada não convexa

† Matriz do sistema de equações mal condicionada

TABELA 3.4 - Distância suprema entre as hessianas da quadrática ajustada e da função original

Função original: $f(x) = 2x_1^2 + x_2^2 + x_1x_2 + 2x_1$
 Ponto dado: (1, 2)

MODO 1				
M	$\Delta = 1$	$\Delta = 0.1$	$\Delta = 0.01$	$\Delta = 0.001$
6	0.1686811E-04	0.4659593E-03	0.2359688	0.7905734E-01
7	0.7450581E-06	0.4130602E-04	0.4101411E-02	0.5359676
8	0.1192093E-06	0.2807379E-04	0.6272107E-02	0.2730549
9	0.5662441E-06	0.3562868E-04	0.7073849E-02	0.2151681
10	0.5066395E-06	0.4762411E-04	0.2334505E-02	0.5764608
11	0.7301569E-06	0.4506111E-04	0.1068026E-02	0.3116342
12	0.6854534E-06	0.3230572E-04	0.2656758E-02	0.2188464
MODO 2				
M	$\Delta = 1$	$\Delta = 0.1$	$\Delta = 0.01$	$\Delta = 0.001$
6	0.3874302E-06	0.1218021E-03	0.1346833E-01	0.1875644 †
7	0.1966953E-05	0.1063049E-03	0.1228885E-01	0.7622533 †
8	0.1192093E-05	0.8988380E-04	0.1782632E-01	1.059556
9	0.1370907E-05	0.1111701E-03	0.1808071E-01	0.6763259
10	0.1728535E-05	0.2113804E-03	0.2075928E-01	0.3928129
11	0.2294779E-05	0.2323464E-03	0.2187765E-01	0.1154912
12	0.1102686E-05	0.7107854E-04	0.7294551E-02	0.9369645
MODO 3				
M	$\Delta = 1$	$\Delta = 0.1$	$\Delta = 0.01$	$\Delta = 0.001$
6	0.8791685E-06	0.6422400E-04	0.1715469E-01	0.7399738 †
7	0.8575618E-05	0.4968047E-04	0.1943224E-01	0.6028575 †
8	0.1296401E-05	0.3440380E-03	0.1789156E-01	0.3380840
9	0.1646578E-05	0.5665421E-04	0.5686194E-01	0.9531532
10	0.3819510E-05	0.2167821E-03	0.8240037E-01	0.4011175
11	0.4768372E-06	0.2126396E-04	0.1331925E-01	0.3520767
12	0.1132488E-05	0.1290962E-03	0.6875902E-02	1.084485
MODO 4				
M	$\Delta = 1$	$\Delta = 0.1$	$\Delta = 0.01$	$\Delta = 0.001$
6	0.6258488E-06	0.4110634E-03	0.7057703E-01	1.028659 †
7	0.3337860E-05	0.4799664E-03	0.2295250E-01	1.710316 †
8	0.3069639E-05	0.1220256E-03	0.1207495E-01	1.241103
9	0.4470348E-05	0.2347529E-03	0.2896979E-01	0.4730235 †
10	0.3278255E-05	0.1329780E-03	0.1045856E-01	0.4086951 †
11	0.2652407E-05	0.1132488E-03	0.1048747E-01	1.159852
12	0.6973743E-05	0.4036427E-03	0.1442525E-01	1.128301

† Matriz do sistema de equações mal condicionada

TABELA 3.5 - Distância suprema entre as hessianas da quadrática ajustada e da função original

Função original: $f(x) = 2x_1^2 + x_2^2 + x_1x_2 + 2x_1$

Ponto dado: (0.2, 0.3)

MODO 1				
M	$\Delta = 1$	$\Delta = 0.1$	$\Delta = 0.01$	$\Delta = 0.001$
6	0.2712011E-05	0.3832579E-04	0.3702760E-02	1.811593
7	0.2980232E-06	0.2592802E-05	0.4194975E-03	0.1215819E-01
8	0.7450580E-07	0.2101064E-05	0.1615882E-03	0.2155544E-01
9	0.1266599E-06	0.4127622E-05	0.1697540E-03	0.1330055E-01
10	0.5960464E-07	0.5364418E-06	0.3463030E-04	0.1069364E-01
11	0.4470348E-07	0.2726912E-05	0.2135932E-03	0.4319459E-02
12	0.1192093E-06	0.3650784E-06	0.3737807E-03	0.5232751E-02
MODO 2				
M	$\Delta = 1$	$\Delta = 0.1$	$\Delta = 0.01$	$\Delta = 0.001$
6	0.3576279E-06	0.4738569E-05	0.7078052E-03	0.7381073E-01
7	0.2384186E-06	0.3457069E-05	0.6267726E-03	0.2765009E-01
8	0.3576279E-06	0.4321337E-05	0.3708154E-03	0.4870644E-01
9	0.8940697E-06	0.4231930E-05	0.1888275E-03	0.3553739E-01
10	0.1072884E-05	0.5692244E-05	0.4937053E-03	0.7869491E-01
11	0.7748604E-06	0.6973743E-05	0.6579757E-03	0.1507588
12	0.9834766E-06	0.1865625E-04	0.1258492E-02	0.3416398E-01
MODO 3				
M	$\Delta = 1$	$\Delta = 0.1$	$\Delta = 0.01$	$\Delta = 0.001$
6	0.8940697E-07	0.1231581E-04	0.2958310E-02	0.6027412
7	0.3278255E-06	0.1770258E-04	0.6358921E-03	0.1050081
8	0.2756715E-06	0.1922250E-05	0.4530326E-03	0.7155153E-01
9	0.4768372E-06	0.1405180E-04	0.1677871E-03	0.1114975
10	0.1192093E-06	0.1773238E-04	0.1287883E-03	0.1115519
11	0.1639128E-06	0.4798170E-05	0.2307296E-03	0.4079394E-01
12	0.3874302E-06	0.5155802E-05	0.2620220E-03	0.8454922E-01
MODO 4				
M	$\Delta = 1$	$\Delta = 0.1$	$\Delta = 0.01$	$\Delta = 0.001$
6	0.7748604E-06	0.8195639E-05	0.1818538E-02	0.3356323E-01
7	0.4470348E-06	0.6675720E-05	0.1752406E-02	0.9721765E-01
8	0.9536743E-06	0.9626150E-05	0.4056990E-03	0.1766955
9	0.5960464E-06	0.2487004E-04	0.5109012E-03	0.3116977E-01
10	0.5364418E-06	0.2890825E-05	0.8357465E-03	0.2532630
11	0.1251698E-05	0.3397465E-05	0.2912909E-02	0.3840047
12	0.5066395E-06	0.1102686E-05	0.8908361E-03	0.4457372

TABELA 3.6 - Distância suprema entre as hessianas da quadrática ajustada e da função original

Função original: $f(x) = 2x_1^2 + x_2^2 + x_1x_2 + 2x_1$

Ponto dado: $(-50, 60)$

MODO 1				
M	$\Delta = 10$	$\Delta = 1$	$\Delta = 0.1$	$\Delta = 0.01$
6	0.1178384E-03	0.2986234E-01	2.783766	0.6430802 †
7	0.2026558E-05	0.3174245E-03	0.2858159E-01	3.326112 †
8	0.1892447E-05	0.4899800E-03	0.5925219E-02	1.251682 †
9	0.2324581E-05	0.1486987E-03	0.1383984E-01	3.073734 †
10	0.6854534E-06	0.3692508E-03	0.1866806E-01	1.423358 †
11	0.1847744E-05	0.6085038E-03	0.4429090E-01	2.462132 *†
12	0.1668930E-05	0.1835227E-03	0.3110987E-01	0.3284655 †
MODO 2				
M	$\Delta = 10$	$\Delta = 1$	$\Delta = 0.1$	$\Delta = 0.01$
6	0.4857779E-05	0.4744381E-03	0.8519865E-01	2.877092 *†
7	0.9357929E-05	0.6164610E-03	0.4670617E-01	5.724451 *†
8	0.7048249E-05	0.8710474E-03	0.1240860	0.8851416 †
9	0.7927418E-05	0.6106943E-03	0.4782447E-01	2.876994 *†
10	0.5334616E-05	0.7906407E-03	0.1549734	2.493166 *†
11	0.1290441E-04	0.1958609E-03	0.1133659E-01	3.859984 *†
12	0.1680851E-04	0.1935810E-03	0.6459895E-01	2.877382 *†
MODO 3				
M	$\Delta = 10$	$\Delta = 1$	$\Delta = 0.1$	$\Delta = 0.01$
6	0.1247227E-04	0.3013864E-02	0.2899662	2.199361 †
7	0.2523512E-04	0.2893895E-02	0.2429697	0.5719160 †
8	0.3635883E-05	0.3031656E-02	0.1302438	2.011069
9	0.9834766E-06	0.2816334E-02	0.9030858E-01	0.6948766 †
10	0.7845461E-05	0.1891494E-02	0.6268413E-01	1.304404 †
11	0.9343028E-05	0.1611799E-02	0.7777166E-01	2.731621 †
12	0.4738569E-05	0.1995131E-02	0.8841266E-01	7.045241 †
MODO 4				
M	$\Delta = 10$	$\Delta = 1$	$\Delta = 0.1$	$\Delta = 0.01$
6	0.1341105E-04	0.1732677E-02	0.2187629	2.878539 *†
7	0.2101064E-04	0.2401769E-02	0.6794763E-01	1.459430 †
8	0.1516938E-04	0.4110888E-02	0.8642983E-01	2.877331 *†
9	0.1847744E-04	0.3108680E-02	0.1780844	0.4017276 †
10	0.2032518E-04	0.7089078E-03	0.4431614E-01	1.045484 †
11	0.5215406E-05	0.4079551E-02	0.5124172E-01	3.740053 *†
12	0.1507998E-04	0.5536422E-02	0.5148149E-01	18.93980 *†

* Quadrática ajustada não convexa

† Matriz do sistema de equações mal condicionada

TABELA 3.7 - Distância suprema entre as hessianas da quadrática ajustada e da função original

Função original: $f(x) = (2x_1 - x_2)^2 + (x_3 - 200)^2$
 Ponto dado: $(0, 0, 200)$

MODO 1				
M	$\Delta = 100$	$\Delta = 10$	$\Delta = 1$	$\Delta = 0.1$
10	0.1519918E-05	0.5464256E-04 *	0.3092796E-02	2.961572 *†
11	0.6556511E-06	0.2248578E-04 *	0.3766716E-02	0.4807850 *
12	0.1341105E-05	0.6464124E-04	0.4617304E-02	0.3387012 *
13	0.9536743E-06	0.1421571E-03	0.7476866E-02 *	0.6361771E-01 *
14	0.8642673E-06	0.6166101E-04	0.1899534E-01	0.8630423 *
15	0.6258488E-06	0.1762509E-03	0.7687271E-02	0.3116994 *
16	0.8046627E-06	0.3023446E-03	0.6180272E-02	0.8672143 *
17	0.1579523E-05	0.4521012E-04	0.2390742E-02	0.5774474 *
18	0.6556511E-06	0.7894636E-04	0.6768072E-02	0.8742063 *
19	0.1206994E-05	0.1451075E-03	0.7559121E-02	0.1179390 *
20	0.1877546E-05	0.8034706E-04	0.4461288E-02	0.3845986 *
MODO 2				
M	$\Delta = 100$	$\Delta = 10$	$\Delta = 1$	$\Delta = 0.1$
10	0.1192093E-06	0.5686283E-04	0.5236864E-03 *	1.998832 *†
11	0.6556511E-06 *	0.3862381E-04	0.1436508E-01 *	0.5089028
12	0.2682209E-06	0.7724762E-04	0.2002734E-01 *	1.998962 *†
13	0.1192093E-06	0.3755093E-04 *	0.1699001E-01 *	0.3191434
14	0.7152557E-06	0.2306700E-04 *	0.1680362E-01 *	0.3384632
15	0.6854534E-06	0.4492700E-04	0.1732491E-01 *	1.242358
16	0.5364418E-06 *	0.4327297E-04	0.3876388E-02 *	0.5088053
17	0.1430511E-05	0.5567074E-04	0.5680799E-02 *	1.016011
18	0.7152557E-06	0.4553795E-04	0.4408330E-02 *	0.9390314
19	0.5960464E-06	0.9047985E-04	0.3512859E-02 *	0.8484039
20	0.7450581E-06	0.6365776E-04	0.3080189E-02 *	0.9877880
MODO 3				
M	$\Delta = 100$	$\Delta = 10$	$\Delta = 1$	$\Delta = 0.1$
10	0.8225441E-05	0.1176715E-02	0.2356672E-01	2.000387 *†
11	0.8344650E-06	0.4652739E-03	0.2455056E-01	2.000418 *†
12	0.1996756E-05	0.8451939E-04	0.1121020E-01	2.000400 *†
13	0.3576279E-06	0.1299083E-03	0.1494107E-01	1.911032 *
14	0.2056360E-05	0.2140403E-03	0.1121244E-01	0.3489823 *
15	0.6258488E-06	0.1019835E-03	0.3236836E-01	0.9466380 *
16	0.9536743E-06	0.4020333E-04	0.2412632E-01	2.000078 *†
17	0.3209420E-06	0.2428293E-03	0.1355147E-01	0.8447532 *
18	0.1400709E-05	0.2052188E-03	0.1630971E-01	0.7834856 *
19	0.1460314E-05	0.7998943E-04	0.8220077E-02	0.3571224 *
20	0.5662441E-06	0.1395345E-03	0.2714843E-02	1.191382 *
MODO 4				
M	$\Delta = 100$	$\Delta = 10$	$\Delta = 1$	$\Delta = 0.1$
10	0.5751848E-04 *	0.5447313E-02 *	1.993857 *	1.999339 *†
11	0.1430511E-05	0.3584623E-03 *	0.5187994E-01 *	3.425309 *†
12	0.8344650E-06	0.1131039E-03 *	0.1995766E-01 *	1.999322 *†
13	0.5780422E-06 *	0.1281500E-03 *	0.4687488E-02 *	1.999356 *†
14	0.3877416E-06 *	0.3123548E-04	0.1553462E-01 *	1.999348 *†
15	0.8505548E-06 *	0.6964624E-04 *	0.3573414E-02 *	1.999322 *†
16	0.8046627E-06 *	0.9655952E-04 *	0.1941501E-01 *	1.999302 *†
17	0.6146542E-06 *	0.1159906E-03 *	0.1127255E-01	1.999306 *†
18	0.1087785E-05 *	0.1115563E-03 *	0.8192360E-02 *	1.999335 *†
19	0.7599592E-06 *	0.1435280E-03 *	0.8993089E-02 *	0.7157084 *
20	0.2980232E-06 *	0.1564545E-03 *	0.3341601E-02	1.999327 *†

* Quadrática ajustada não convexa

† Matriz do sistema de equações mal condicionada

3.4.2 Análise das tabelas

Observa-se nas tabelas que, de um modo geral, a distância suprema entre as hessianas é consideravelmente pequena. Isso mostra, conforme era esperado, que a quadrática ajustada é a mesma que a quadrática original, o que comprova a confiabilidade do método usado no ajuste.

De uma análise mais detalhada das tabelas, podemos tirar as seguintes conclusões:

- A qualidade do ajuste é a mesma, quando é aumentado o número de pontos na malha de dados;
- O modo de geração da malha de dados não influencia no ajuste;
- À medida que os pontos se tornam mais próximos uns dos outros, ou seja, quando o valor de Δ é muito pequeno, a qualidade do ajuste piora devido, evidentemente, ao mal condicionamento da matriz que dá origem ao sistema de equações lineares. Nestes casos, alguns ajustes produziram quadráticas não convexas;
- Quanto mais os pontos se distanciam entre si, melhor é o ajuste; ou seja, existe um valor de Δ que, conforme podemos constatar nas tabelas, é da ordem da norma máxima do *ponto dado*, cujo valor produz um ajuste muito bom. O ajuste continua sendo bom e pode até melhorar se aumentarmos o valor de Δ a partir deste Δ ótimo.

Uma observação importante a ser feita é que na tabela 3.7 aparecem alguns casos de ajustes que produziram quadráticas não convexas, apesar da proximidade entre a quadrática ajustada e a original. Isto é razoável, visto que a função original não é estritamente convexa, e por erro numérico de arredondamento, a quadrática ajustada pode resultar não convexa.

3.5 Conclusão

Os resultados numéricos obtidos foram, de modo geral, satisfatórios, conforme era esperado. Com isto, podemos afirmar que o modelo usado é confiável.

Entretanto, fica evidente que a distância entre os pontos usados no ajuste influencia de maneira significativa na qualidade do mesmo. Os melhores ajustes são obtidos quando a distância entre os pontos é maior ou

igual á *norma suprema do ponto dado*. Certamente, se os pontos da malha estiverem muito próximos uns dos outros, a quadrática ajustada poderá resultar de um sistema de equações com matriz mal condicionada, sendo o ajuste neste caso não satisfatório.

Capítulo 4

Experiências numéricas com quadráticas com perturbação

4.1 Introdução

Uma vez comprovada a confiabilidade do modelo usado, torna-se necessário mostrar experiências numéricas que se aproximem da realidade, ou seja, experiências numéricas com funções cuja avaliação retrata valores obtidos através de experimentos práticos observáveis, onde sempre ocorre um certo erro de medição ou ruído.

Estes experimentos podem ser simulados computacionalmente através de testes com funções quadráticas perturbadas. Uma quadrática é dita *perturbada* se sua avaliação em um determinado ponto for diferente da avaliação obtida através de sua expressão analítica neste mesmo ponto. Por exemplo, se $Q(x)$ é uma função quadrática, a quadrática perturbada pode ser expressa por:

$$Q'(x) = Q(x)(1 + p) \tag{4.1}$$

onde x é um vetor pertencente ao \mathbb{R}^n e p depende do grau de perturbação desejado.

Neste capítulo mostramos as experiências numéricas realizadas com quadráticas perturbadas.

4.2 Experiências numéricas realizadas

Usamos o mesmo modelo descrito anteriormente no item 3.2 do capítulo 3, com a diferença que, aplicamos à função quadrática original perturbações em diferentes graus para efeito de comparação.

Da mesma forma que as experiências numéricas do capítulo anterior, foram feitos vários ajustes onde foram considerados:

1. O modo de obtenção da malha de dados (item 3.3 do capítulo 3);
2. A proximidade entre os pontos da malha (Δ);
3. O número de pontos pertencentes à malha de dados (M);
4. O grau de perturbação aplicado à quadrática original.

Nestas experiências, consideramos apenas o **Modo 1** e o **Modo 2** de geração dos pontos da malha.

As seguintes funções quadráticas foram usadas no ajuste:

1. $f(x) = (x_1 - 2)^2 + (x_2 - 3)^2$
2. $f(x) = 2x_1^2 + x_2^2 + x_1x_2 + 2x_1$

As duas funções acima são estritamente convexas, e a cada uma delas foram aplicadas perturbações geradas aleatoriamente.

Conforme argumentamos anteriormente, a qualidade do ajuste é medida através da distância suprema entre as hessianas da quadrática ajustada e da quadrática original, e pela convexidade da quadrática obtida.

As tabelas a seguir mostram os resultados obtidos.

TABELA 4.1.a - Distância suprema entre as hessianas da quadrática ajustada e da função original

Função original: $f(x) = (x_1 - 2)^2 + (x_2 - 3)^2$

Ponto dado: (2,3)

$\Delta = 1.0$

MODO 1				
M	Perturb. 1%	Perturb. 5%	Perturb. 10%	Perturb. 20%
6	0.3534498	1.767033 *	3.534011 *	7.067964 *
7	0.3054453E-01	0.1527190	0.3054375	0.6108740
8	0.4305379E-02	0.2152737E-01	0.4305492E-01	0.8610993E-01
9	0.5072892E-02	0.2536897E-01	0.5073906E-01	0.1014792
10	0.4426122E-02	0.2213117E-01	0.4426560E-01	0.8852524E-01
11	0.7016748E-02	0.3508250E-01	0.7016473E-01	0.1403289
12	0.6891578E-02	0.3445786E-01	0.6891586E-01	0.1378316
M	Perturb. 30%	Perturb. 40%	Perturb. 50%	Perturb. 60%
6	10.60192 *	14.13587 *	17.66983 *	21.20378 *
7	0.9163106	1.221747	1.527184	1.832620 *
8	0.1291650	0.1722199	0.2152750	0.2583300
9	0.1522193	0.2029595	0.2536996	0.3044398
10	0.1327881	0.1770507	0.2213135	0.2655762
11	0.2104934	0.2806577	0.3508221	0.4209865
12	0.2067475	0.2756633	0.3445792	0.4134950
M	Perturb. 70%	Perturb. 80%	Perturb. 90%	Perturb. 100%
6	24.73774 *	28.27169 *	31.80565 *	35.33960 *
7	2.138057 *	2.443494 *	2.748930 *	3.054367 *
8	0.3013851	0.3444400	0.3874951	0.4305501
9	0.3551799	0.4059200	0.4566602	0.5074003
10	0.3098390	0.3541017	0.3983644	0.4426272
11	0.4911509	0.5613153	0.6314795	0.7016439
12	0.4824108	0.5513267	0.6202425	0.6891584
MODO 2				
M	Perturb. 1%	Perturb. 5%	Perturb. 10%	Perturb. 20%
6	0.2569541E-01	0.1284714	0.2569411	0.5138808
7	0.2357334E-01	0.1178614	0.2357216	0.4714416
8	0.2377668E-01	0.1188715	0.2377402	0.4754772
9	0.1871976E-01	0.9361371E-01	0.1872300	0.3744652
10	0.1488426E-01	0.7443273E-01	0.1488687	0.2977400
11	0.1620314E-01	0.8100760E-01	0.1620132	0.3240241
12	0.1772442E-01	0.8863166E-01	0.1772655	0.3545335
M	Perturb. 30%	Perturb. 40%	Perturb. 50%	Perturb. 60%
6	0.7708206	1.027760	1.2847025	1.541640
7	0.7071621	0.9428823	1.178605	1.414323
8	0.7132147	0.9509516	1.186942	1.426426
9	0.5617100	0.7489345	0.9361605	1.123404
10	0.4466115	0.5954830	0.7443497	0.8932261
11	0.4860352	0.6480461	0.8100610	0.9720681
12	0.5318015	0.7090697	0.8863332	1.063606
M	Perturb. 70%	Perturb. 80%	Perturb. 90%	Perturb. 100%
6	1.798579	2.055519	2.312459	2.569399
7	1.650043	1.885763	2.121483	2.357204
8	1.664163	1.901901	2.139638	2.377375
9	1.310638	1.497873	1.685107	1.872342
10	1.042098	1.190969	1.339841	1.488712
11	1.134079	1.296090	1.458101	1.620112
12	1.240874	1.418142	1.595410	1.772678

* Quadrática ajustada não convexa

TABELA 4.1.b - Distância suprema entre as hessianas da quadrática ajustada e da função original

Função original: $f(x) = (x_1 - 2)^2 + (x_2 - 3)^2$

Ponto dado: (2,3)

$\Delta = 0.1$

MOD0 1				
M	Perturb. 1%	Perturb. 5%	Perturb. 10%	Perturb. 20%
6	0.3519208	1.768846 *	3.540001 *	7.082313 *
7	0.3064030E-01	0.1528116	0.3055258	0.6109542
8	0.4297376E-02	0.2151933E-01	0.4304680E-01	0.8610171E-01
9	0.5043775E-02	0.2534038E-01	0.5071121E-01	0.1014527
10	0.4433900E-02	0.2213928E-01	0.4427095E-01	0.8853431E-01
11	0.7034034E-02	0.3509884E-01	0.7017994E-01	0.1403419
12	0.7030576E-02	0.3459463E-01	0.6904966E-01	0.1379598
M	Perturb. 30%	Perturb. 40%	Perturb. 50%	Perturb. 60%
6	10.62462 *	14.16694 *	17.70925 *	21.25156 *
7	0.9163826	1.221811	1.527239	1.832668 *
8	0.1291568	0.1722117	0.2152666	0.2583216
9	0.1521942	0.2029357	0.2536773	0.3044188
10	0.1327977	0.1770610	0.2213244	0.2655877
11	0.2105040	0.2806661	0.3508281	0.4209903
12	0.2068698	0.2757799	0.3446900	0.4136901
M	Perturb. 70%	Perturb. 80%	Perturb. 90%	Perturb. 100%
6	24.79387 *	28.33618 *	31.87849 *	35.42080 *
7	2.138096 *	2.443524 *	2.748953 *	3.054381 *
8	0.3013766	0.3444315	0.3874864	0.4305414
9	0.3551603	0.4059019	0.4566434	0.5073849
10	0.3098511	0.3541145	0.3983778	0.4426412
11	0.4911523	0.5613144	0.6314764	0.7016385
12	0.4825102	0.5514203	0.6203304	0.6892405
MOD0 2				
M	Perturb. 1%	Perturb. 5%	Perturb. 10%	Perturb. 20%
6	0.2558133E-01	0.1283521	0.2568155	0.5137422
7	0.2377024E-01	0.1180575	0.2359166	0.4716344
8	0.2406710E-01	0.1191678	0.2380435	0.4757950
9	0.1885775E-01	0.9376016E-01	0.1873879	0.3746435
10	0.1499572E-01	0.7455528E-01	0.1490043	0.2979023
11	0.1630625E-01	0.8110839E-01	0.1621108	0.3241157
12	0.1757032E-01	0.8847523E-01	0.1771064	0.3543689
M	Perturb. 30%	Perturb. 40%	Perturb. 50%	Perturb. 60%
6	0.7706693	1.027596	1.284523	1.541450
7	0.7073523	0.9430703	1.178788	1.414506
8	0.7135466	0.9512982	1.89050	1.426801
9	0.5618990	0.7491549	0.9364103	1.123666
10	0.4468007	0.5956087	0.7445970	0.8934953
11	0.4861206	0.6481258	0.8101310	0.9721362
12	0.5316313	0.7088937	0.8861561	1.063419
M	Perturb. 70%	Perturb. 80%	Perturb. 90%	Perturb. 100%
6	1.798377	2.055304	2.312231	2.569157
7	1.650224	1.885942	2.121660	2.357378
8	1.664553	1.902304	2.140056	2.377807
9	1.310922	1.498177	1.685433	1.872688
10	1.042393	1.191292	1.340190	1.489088
11	1.134141	1.296146	1.458151	1.620156
12	1.240681	1.417943	1.595206	1.772468

* Quadrática ajustada não convexa

TABELA 4.1.c - Distância suprema entre as hessianas da quadrática ajustada e da função original

Função original: $f(x) = (x_1 - 2)^2 + (x_2 - 3)^2$

Ponto dado: (2,3)

$\Delta = 0.01$

MODO 1				
M	Perturb. 1%	Perturb. 5%	Perturb. 10%	Perturb. 20%
6	0.6179199	1.716828 *	3.090459 *	5.837725 *
7	0.3099450E-01	0.1511856	0.3030874	0.6068912
8	0.6220713E-02	0.2102194E-01	0.4254386E-01	0.8558779E-01
9	0.3974020E-02	0.2205151E-01	0.4743432E-01	0.9819996E-01
10	0.4422456E-02	0.1979453E-01	0.4033583E-01	0.8464226E-01
11	0.1109174E-01	0.2531472E-01	0.6093737E-01	0.1321827
12	0.6849885E-02	0.2542628E-01	0.6026222E-01	0.1299342
M	Perturb. 30%	Perturb. 40%	Perturb. 50%	Perturb. 60%
6	8.584995 *	11.33226 *	14.07953 *	16.82679 *
7	0.9106949	1.214499	1.518302	1.822106
8	0.1286316	0.1716755	0.2147193	0.2577633
9	0.1489655	0.1997311	0.2504967	0.3012624
10	0.1289487	0.1732551	0.2175615	0.2618679
11	0.2034281	0.2746734	0.3459188	0.4171641
12	0.1996061	0.2692780	0.3389499	0.4086219
M	Perturb. 70%	Perturb. 80%	Perturb. 90%	Perturb. 100%
6	19.57406 *	22.32133 *	25.06859 *	27.81586 *
7	2.125910 *	2.429714 *	2.733517 *	3.037321 *
8	0.3008071	0.3438510	0.3868949	0.4299388
9	0.3520280	0.4027935	0.4535591	0.5043247
10	0.3061743	0.3504806	0.3947871	0.4390936
11	0.4884095	0.5596548	0.6309002	0.7021456
12	0.4782838	0.5479657	0.6176376	0.6873096
MODO 2				
M	Perturb. 1%	Perturb. 5%	Perturb. 10%	Perturb. 20%
6	0.2416813E-01	0.1225222	0.2506237	0.5068268
7	0.3340048E-01	0.1118369	0.2301679	0.4668300
8	0.1786634E-01	0.1040320	0.2227387	0.4601526
9	0.2698951E-01	0.5980977E-01	0.1518247	0.3358548
10	0.2704799E-01	0.8547863E-01	0.1598710	0.3086554
11	0.1864327E-01	0.6902051E-01	0.1505884	0.3137242
12	0.2715427E-01	0.9799525E-01	0.1865462	0.3636482
M	Perturb. 30%	Perturb. 40%	Perturb. 50%	Perturb. 60%
6	0.7630298	1.019233	1.275436	1.531639
7	0.7034921	0.9401543	1.176816	1.413478
8	0.6975663	0.9349798	1.172394	1.409807
9	0.5198847	0.7039146	0.8879447	1.071974
10	0.4574401	0.6062245	0.7550092	0.9037933
11	0.4768596	0.6399954	0.8031310	0.9662666
12	0.5407504	0.7178523	0.8949543	1.072057
M	Perturb. 70%	Perturb. 80%	Perturb. 90%	Perturb. 100%
6	1.787842	2.044046	2.300248	2.556452
7	1.650140	1.886802	2.123465	2.360127
8	1.647221	1.884635	1.122049	2.359462
9	1.256005	1.440034	1.624064	1.808094
10	1.052578	1.201362	1.350147	1.498932
11	1.129403	1.292538	1.455674	1.618810
12	1.249159	1.426261	1.603363	1.780465

* Quadrática ajustada não convexa

TABELA 4.1.d - Distância suprema entre as hessianas da quadrática ajustada e da função original

Função original: $f(x) = (x_1 - 2)^2 + (x_2 - 3)^2$

Ponto dado: (2, 3)

$\Delta = 0.001$

MODO 1				
M	Perturb. 1%	Perturb. 5%	Perturb. 10%	Perturb. 20%
6	1.388267 *†	1.438690 *†	1.509986 *†	1.652578 *†
7	2.183307 *†	2.166458 *†	2.145396 *†	2.103272 *†
8	0.217709	0.2312808	0.2479181	0.2811928
9	0.7900229	0.7994746	0.8112802	0.8349187
10	0.4047294	0.4183560	0.4353891	0.4694553
11	0.4071918	0.4162438	0.4314982	0.5214591
12	0.4991362	0.5139366	0.5324372	0.5694381
M	Perturb. 30%	Perturb. 40%	Perturb. 50%	Perturb. 60%
6	1.795170 *†	1.937762 *†	2.080354 *†	2.237855 *†
7	2.061149 *†	2.019025 *†	1.976902 *†	1.934778 *†
8	0.3144675	0.3477422	0.3810169	0.4142916
9	0.8585481	0.8821776	0.9058070	0.9294364
10	0.5100978	0.5563523	0.6026066	0.6488610
11	0.6114201	0.7013810	0.7913419	0.8813029
12	0.6064391	0.6434401	0.6804410	0.7174421
M	Perturb. 70%	Perturb. 80%	Perturb. 90%	Perturb. 100%
6	2.852452 *†	3.467049 *†	4.081646 *†	4.696243 *†
7	1.892654 *†	1.850531 *†	1.808407 *†	1.766284 *†
8	0.4535921	0.5008343	0.5480765	0.5953187
9	0.9530659	0.9766953	1.000325	1.023954
10	0.6951154	0.7413698	0.7876242	0.8338785
11	0.9712638	1.061225	1.151186	1.241147
12	0.7544430	0.7914440	0.8284449	0.8654460
MODO 2				
M	Perturb. 1%	Perturb. 5%	Perturb. 10%	Perturb. 20%
6	1.342249 *†	1.308201 *†	1.265640 *†	1.190251 *†
7	1.891230 *†	1.880888 *†	1.867960 *†	1.842102 *†
8	2.070734 *†	2.074364 *†	2.078901 *†	2.087975 *†
9	1.588111 †	1.576674 †	1.562377 †	1.533783 †
10	1.683571 †	1.680632 †	1.676958 †	1.669611 *†
11	1.934070 *†	1.919664 *†	1.901656 *†	1.865641 *†
12	1.837483 *†	1.825857 *†	1.811326 *†	1.782262 *†
M	Perturb. 30%	Perturb. 40%	Perturb. 50%	Perturb. 60%
6	1.313959 *†	1.437668 *†	1.561377 *†	1.685086 *†
7	1.816247 *†	1.790390 *†	1.764534 *†	1.738678 *†
8	2.097049 *†	2.106123 *†	2.115197 *†	2.124271 *†
9	1.505190 †	1.476596 †	1.448002 †	1.4189408 †
10	1.662264 *†	1.654917 *†	1.647570 *†	1.640223 *†
11	1.829626 *†	1.793611 *†	1.757596 *†	1.721581 *†
12	1.753198 *†	1.724135 *†	1.695071 *†	1.666008 *†
M	Perturb. 70%	Perturb. 80%	Perturb. 90%	Perturb. 100%
6	1.808794 *†	1.932503 *†	2.056211 *†	2.179920 *†
7	1.712821 *†	1.686965 *†	1.791989 *†	2.013387 *†
8	2.253914 *†	2.546804 *†	2.839695 *†	3.132586 *†
9	1.390815 †	1.362221 †	1.333627 †	1.368392 †
10	1.632876 *†	1.625529 *†	1.618182 *†	1.610835 *†
11	1.685566 *†	1.649551 *†	1.613536 *†	1.577521 *†
12	1.636944 *†	1.607880 *†	1.578817 *†	1.549753 *†

* Quadrática ajustada não convexa

† Matriz do sistema de equações mal condicionada

TABELA 4.2.a - Distância suprema entre as hessianas da quadrática ajustada e da função original

Função original: $f(x) = (x_1 - 2)^2 + (x_2 - 3)^2$

Ponto dado: (1, 60)

$\Delta = 1.0$

MODO 1				
M	Perturb. 1%	Perturb. 5%	Perturb. 10%	Perturb. 20%
6	3081.762 *	15408.86 *	30817.70 *	61635.63 *
7	99.74225 *	498.7118 *	997.4239 *	1994.847 *
8	25.80220 *	129.0117 *	258.0241 *	516.0477 *
9	24.17921 *	120.8963 *	241.7927 *	483.5851 *
10	25.25540 *	126.2783 *	252.5569 *	505.1135 *
11	42.98949 *	214.9482 *	429.8964 *	859.7928 *
12	40.07387 *	200.3702 *	400.7405 *	801.4807 *
M	Perturb. 30%	Perturb. 40%	Perturb. 50%	Perturb. 60%
6	92453.09 *	123270.8 *	154088.4 *	184906.5 *
7	2992.271 *	3989.695 *	4987.120 *	5984.543 *
8	774.0718 *	1032.096 *	1290.120 *	1548.144 *
9	725.3778 *	967.1704 *	1208.963 *	1450.755 *
10	757.6701 *	1010.227 *	1262.784 *	1515.341 *
11	1289.689 *	1719.586 *	2149.482 *	2579.378 *
12	1202.221 *	1602.962 *	2003.702 *	2404.442 *
M	Perturb. 70%	Perturb. 80%	Perturb. 90%	Perturb. 100%
6	215723.4 *	246541.7 *	277359.8 *	308176.6 *
7	6981.967 *	7979.391 *	8976.815 *	9974.238 *
8	1806.168 *	2064.192 *	2322.216 *	2580.240 *
9	1692.548 *	1934.341 *	2176.133 *	2417.926 *
10	1767.898 *	2020.454 *	2273.011 *	2525.568 *
11	3009.275 *	3439.171 *	3869.068 *	4298.964 *
12	2805.183 *	3205.923 *	3606.663 *	4007.404 *
MODO 2				
M	Perturb. 1%	Perturb. 5%	Perturb. 10%	Perturb. 20%
6	157.1508	785.7538	1571.508	3143.015
7	82.84390	414.2186	828.4378	1656.874
8	76.88590	384.4430	768.8609	1537.721
9	69.79951	348.0990	697.9988	1395.997
10	44.25458 *	221.2710 *	442.5417 *	885.0829 *
11	39.55560	197.7800	395.5593	791.1199
12	83.53131	417.6570	835.3148	1670.630
M	Perturb. 30%	Perturb. 40%	Perturb. 50%	Perturb. 60%
6	4714.523	6386.030	7857.538	9429.046
7	2485.312	3313.748	4142.186	4970.624
8	2306.582	3075.443	3844.304	4613.165
9	2093.996	2791.994	3489.993	4187.992
10	1327.625 *	1770.166 *	2212.708 *	2655.249 *
11	1186.679	1582.240	1977.800	2373.360
12	2505.944	3341.258	4176.574	5011.888
M	Perturb. 70%	Perturb. 80%	Perturb. 90%	Perturb. 100%
6	11000.55	12572.06	14143.57	15715.08
7	5799.061	6627.498	7455.935	8284.373
8	5382.026	6150.886	6919.747	7609.607
9	4885.990	5583.989	6281.987	6979.987
10	3097.791 *	3540.332 *	3982.874 *	4425.415 *
11	2768.921	3164.478	3560.040	3955.599
12	5847.203	6682.518	7517.830	8353.146

* Quadrática ajustada não convexa

TABELA 4.2.b - Distância suprema entre as hessianas da quadrática ajustada e da função original

Função original: $f(x) = (x_1 - 2)^2 + (x_2 - 3)^2$

Ponto dado: (1,60)

$\Delta = 0.1$

MOD0 1				
M	Perturb. 1%	Perturb. 5%	Perturb. 10%	Perturb. 20%
6	143759.3 *	718796.1 *	1437591. *	2875185. *
7	9678.060 *	48390.36 *	96780.75 *	193561.5 *
8	2620.653 *	13103.28 *	26206.57 *	52413.12 *
9	2484.119 *	12420.60 *	24841.21 *	49682.42 *
10	2575.007 *	12875.04 *	25750.11 *	51500.22 *
11	4186.667 *	20933.35 *	41866.71 *	83733.39 *
12	3945.672 *	19728.35 *	39456.70 *	78913.41 *
M	Perturb. 30%	Perturb. 40%	Perturb. 50%	Perturb. 60%
6	4312775. *	5750369. *	7187964. *	8625551. *
7	290342.2 *	387122.9 *	483903.7 *	580684.4 *
8	78619.69 *	104826.2 *	131032.8 *	157239.4 *
9	74523.62 *	99364.82 *	124206.0 *	149047.2 *
10	77250.33 *	103000.4 *	128750.6 *	154500.6 *
11	125600.1 *	167466.8 *	209333.5 *	251200.2 *
12	118370.1 *	157826.8 *	197283.5 *	236740.2 *
M	Perturb. 70%	Perturb. 80%	Perturb. 90%	Perturb. 100%
6	0.1006315E+08 *	0.1150073E+08 *	0.1293833E+02 *	0.1437592E+08 *
7	677465.1 *	774245.8 *	871026.6 *	967807.3 *
8	183445.9 *	209652.5 *	235859.0 *	262065.6 *
9	173688.4 *	198729.7 *	223570.8 *	248412.1 *
10	180250.8 *	206000.9 *	231751.0 *	257501.1 *
11	293066.9 *	334933.6 *	376800.3 *	418666.9 *
12	276196.9 *	315653.6 *	355110.3 *	394567.0 *
MOD0 2				
M	Perturb. 1%	Perturb. 5%	Perturb. 10%	Perturb. 20%
6	15257.33	76286.73	152573.4	305146.9
7	7760.058	38800.18	77600.37	155200.8
8	7203.131	36015.48	72031.01	144062.0
9	6534.940	32674.39	65348.76	130697.5
10	4271.247 *	21356.30 *	42712.53 *	85425.00 *
11	4113.663	20568.37	41136.70	82273.48
12	8435.459	42177.39	84354.80	168709.7
M	Perturb. 30%	Perturb. 40%	Perturb. 50%	Perturb. 60%
6	457720.4	610293.8	762867.3	915440.8
7	232801.2	310401.5	388001.9	465602.3
8	216092.9	288123.9	360154.8	432185.9
9	196046.2	261394.9	326743.6	392092.4
10	128137.5 *	170850.0 *	213562.5 *	256274.9 *
11	123410.2	164546.9	205683.6	246820.4
12	253064.5	337419.4	421774.3	506129.0
M	Perturb. 70%	Perturb. 80%	Perturb. 90%	Perturb. 100%
6	1068014.	1220588.	1373169.	1525735.
7	543202.6	620803.1	698403.4	776003.8
8	504216.8	576247.8	648278.7	720309.7
9	457441.0	522789.7	588138.4	653487.2
10	298987.5 *	341699.9 *	384412.5 *	427124.9 *
11	287957.1	329093.7	370230.6	411367.3
12	590483.8	674838.7	759193.6	843548.5

* Quadrática ajustada não convexa

TABELA 4.2.c - Distância suprema entre as hessianas da quadrática ajustada e da função original

Função original: $f(x) = (x_1 - 2)^2 + (x_2 - 3)^2$

Ponto dado: (1,60)

$\Delta = 0.01$

MODO 1				
M	Perturb. 1%	Perturb. 5%	Perturb. 10%	Perturb. 20%
6	1686093. *†	8430456. *†	0.1686091E+08 *†	0.3372181E+08 *†
7	167645.1 *†	838232.3 *†	1676469. *†	3352927. *†
8	183265.9 *†	916329.3 *†	1832656. *†	3665311. *†
9	187866.9 *†	939335.1 *†	1878673. *†	3757340. *†
10	137071.4 *†	685354.6 *†	1370709. *†	2741419. *†
11	115019.2	575098.1	1150194.	2300388.
12	109839.8 *	549198.9 *	1098397. *	2196793. *
M	Perturb. 30%	Perturb. 40%	Perturb. 50%	Perturb. 60%
6	0.5058272E+08 *†	0.6744362E+08 *†	0.8430452E+08 *†	0.1011654E+09 *†
7	5029398. *†	6705862. *†	8382332. *†	0.1005879E+08 *†
8	5497967. *†	7330621. *†	9163277. *†	0.1099593E+08 *†
9	5636014. *†	7514680. *†	9393351. *†	0.1127202E+08 *†
10	4112127. *†	5482838. *†	6853552. *†	8224258. *†
11	3450583.	4600776.	5750973.	6901165.
12	3295191. *	4393587. *	5491984. *	6590381. *
M	Perturb. 70%	Perturb. 80%	Perturb. 90%	Perturb. 100%
6	0.1180263E+09 *†	0.1348873E+09 *†	0.1517482E+09 *†	0.1686090E+09 *†
7	0.1173526E+08 *†	0.1341173E+08 *†	0.1508820E+08 *†	0.1676466E+08 *†
8	0.1282859E+08 *†	0.1466124E+08 *†	0.1649390E+08 *†	0.1832655E+08 *†
9	0.1315069E+08 *†	0.1502936E+08 *†	0.1690804E+08 *†	0.1878670E+08 *†
10	9594061. *†	0.1096567E+08 *†	0.1233638E+08 *†	0.1370710E+08 *†
11	8051360.	9201553.	0.1035175E+08	0.1150194E+08
12	7688777. *	8787174. *	9885570. *	0.1098397E+08 *
MODO 2				
M	Perturb. 1%	Perturb. 5%	Perturb. 10%	Perturb. 20%
6	923597.2 *†	4617986. *†	9235970. *†	0.1847194E+08 *†
7	1071902. *†	5359504. *†	0.1071901E+08 *†	0.2143801E+08 *†
8	1085414. *†	5427050. *†	0.1085410E+08 *†	0.2179819E+08 *†
9	193471.4 *†	967351.0 *†	1934698. *†	3869401. *†
10	492026.0 *†	2460126. *†	4920251. *†	9840496. *†
11	460526.0 *†	2302634. *†	4605267. *†	9210535. *†
12	911031.0 *†	4555166. *†	9110325. *†	0.1822065E+08 *†
M	Perturb. 30%	Perturb. 40%	Perturb. 50%	Perturb. 60%
6	0.2770791E+08 *†	0.3694388E+08 *†	0.4617985E+08 *†	0.5541582E+08 *†
7	0.3215702E+08 *†	0.4287603E+08 *†	0.5359503E+08 *†	0.6431404E+08 *†
8	0.3256229E+08 *†	0.4341638E+08 *†	0.5427048E+08 *†	0.6512457E+08 *†
9	5804101. *†	7738806. *†	9673506. *†	0.1160820E+08 *†
10	0.1476075E+08 *†	0.1968100E+08 *†	0.2460125E+08 *†	0.2952150E+08 *†
11	0.1381580E+08 *†	0.1842107E+08 *†	0.2302634E+08 *†	0.2763161E+08 *†
12	0.2733098E+08 *†	0.3644131E+08 *†	0.4555163E+08 *†	0.5466190E+08 *†
M	Perturb. 70%	Perturb. 80%	Perturb. 90%	Perturb. 100%
6	0.6465179E+08 *†	0.7388775E+08 *†	0.8312373E+08 *†	0.9235970E+08 *†
7	0.7503304E+08 *†	0.8575205E+08 *†	0.9647106E+08 *†	0.1071901E+08 *†
8	0.7597867E+08 *†	0.8683277E+08 *†	0.9768686E+08 *†	0.1084110E+08 *†
9	0.1354290E+08 *†	0.1547761E+08 *†	0.1741231E+08 *†	0.1934700E+08 *†
10	0.3444174E+08 *†	0.3936199E+08 *†	0.4428224E+08 *†	0.4920249E+08 *†
11	0.3223686E+08 *†	0.3684215E+08 *†	0.4144741E+08 *†	0.4605268E+08 *†
12	0.6377229E+08 *†	0.7288261E+08 *†	0.8199294E+08 *†	0.9110327E+08 *†

* Quadrática ajustada não convexa

† Matriz do sistema de equações mal condicionada

TABELA 4.3.a - Distância suprema entre as hessianas da quadrática ajustada e da função original

Função original: $f(x) = 2x_1^2 + x_2^2 + x_1x_2 + 2x_1$
 Ponto dado: (1, 2)
 $\Delta = 1.0$

MODO 1				
M	Perturb. 1%	Perturb. 5%	Perturb. 10%	Perturb. 20%
6	8.247880 *	41.23938 *	82.47880 *	164.9576 *
7	0.2720445	1.360227	2.720454 *	5.440907 *
8	0.2356806	1.178399	2.356799	4.713597 *
9	0.2382873	1.191432	2.382863	4.765727 *
10	0.2278517	1.139256	2.278512	4.557023 *
11	0.2121251	1.060623	2.121246 *	4.242491 *
12	0.1669951	0.8349732	1.669946	3.339891 *
M	Perturb. 30%	Perturb. 40%	Perturb. 50%	Perturb. 60%
6	247.4364 *	329.9152 *	412.3940 *	494.8729 *
7	8.161361 *	10.88181 *	13.60227 *	16.32272 *
8	7.070396 *	9.427194 *	11.78399 *	14.14079 *
9	7.148590 *	9.531452 *	11.91432 *	14.29718 *
10	6.835535 *	9.114047 *	11.39256 *	13.67107 *
11	6.363738 *	8.484984 *	10.60623 *	12.72748 *
12	5.009838 *	6.679783 *	8.349730 *	10.01968 *
M	Perturb. 70%	Perturb. 80%	Perturb. 90%	Perturb. 100%
6	577.3517 *	659.8305 *	742.3093 *	824.7881 *
7	19.04318 *	21.76363 *	24.48408 *	27.20454 *
8	16.49759 *	18.85439 *	21.21119 *	23.56798 *
9	16.68004 *	19.06290 *	21.44577 *	23.82863 *
10	15.94958 *	18.22809 *	20.50660 *	22.78512 *
11	14.84872 *	16.96997 *	19.09121 *	21.21246 *
12	11.68962 *	13.35957 *	15.02951 *	16.69946 *
MODO 2				
M	Perturb. 1%	Perturb. 5%	Perturb. 10%	Perturb. 20%
6	0.6938005	3.469000	6.938000	13.87600
7	0.4552459	2.276245	4.552489	9.104982
8	0.4521275	2.260644	4.521290	9.042582
9	0.3173354	1.586674	3.173351	6.346705
10	0.1642578	0.8212827	1.642568	3.285135
11	0.3233326	1.616658	3.233320	6.466638
12	0.5192211	2.596114	5.192227	10.38445
M	Perturb. 30%	Perturb. 40%	Perturb. 50%	Perturb. 60%
6	20.81400	27.75199	34.68999	41.62799
7	13.65747	18.20996	22.76245	27.31495
8	13.56387	18.08516	22.60645	27.12774
9	9.520058	12.69341	15.86676	19.04011
10	4.927703	6.570269	8.212839	9.855405
11	9.699952	12.93327	16.16659	19.39991
12	15.57668	20.76891	25.96113	31.15336
M	Perturb. 70%	Perturb. 80%	Perturb. 90%	Perturb. 100%
6	48.56599	55.50399	62.44199	69.37999
7	31.86743	36.41993	40.97242	45.52491
8	31.64904	36.17032	40.69161	45.21290
9	22.21347	25.38682	28.56017	31.73352
10	11.49797	13.14054	14.78310	16.42567
11	22.63322	25.86055	29.09986	32.33318
12	36.34559	41.53781	46.73004	51.92227

* Quadrática ajustada não convexa

TABELA 4.3.b - Distância suprema entre as hessianas da quadrática ajustada e da função original

Função original: $f(x) = 2x_1^2 + x_2^2 + x_1x_2 + 2x_1$

Ponto dado: (1,2)

$\Delta = 0.1$

MODO 1				
M	Perturb. 1%	Perturb. 5%	Perturb. 10%	Perturb. 20%
6	924.8385 *	4624.190 *	9248.376 *	18496.75 *
7	29.46959 *	147.3479 *	294.6958 *	589.3916 *
8	7.749700 *	38.74845 *	77.49690 *	154.9938 *
9	7.303790 *	36.51880 *	73.03753 *	146.0751 *
10	7.737959 *	38.68974 *	77.37941 *	154.7588 *
11	13.44496 *	67.22470 *	134.4491 *	268.8988 *
12	12.52066 *	62.60288 *	125.2058 *	250.4116 *
M	Perturb. 30%	Perturb. 40%	Perturb. 50%	Perturb. 60%
6	27745.13 *	36993.51 *	46241.89 *	55490.27 *
7	884.0874 *	1178.783 *	1473.479 *	1768.175 *
8	232.4905 *	309.9874 *	387.4842 *	464.9811 *
9	219.1126 *	292.1502 *	365.1876 *	438.2252 *
10	232.1382 *	309.5176 *	386.8969 *	464.2762 *
11	403.3481 *	537.7975 *	672.2468 *	806.6962 *
12	375.6173 *	500.8231 *	626.0288 *	751.2345 *
M	Perturb. 70%	Perturb. 80%	Perturb. 90%	Perturb. 100%
6	64738.64 *	73987.02 *	83235.40 *	92483.78 *
7	2062.871 *	2357.567 *	2652.262 *	2946.958 *
8	542.4779 *	619.9747 *	697.4716 *	774.9685 *
9	511.2626 *	584.3002 *	657.3377 *	730.3752 *
10	541.6557 *	619.0351 *	696.4145 *	773.7939 *
11	941.1455 *	1075.595 *	1210.044 *	1344.494 *
12	876.4404 *	1001.646 *	1126.852 *	1252.058 *
MODO 2				
M	Perturb. 1%	Perturb. 5%	Perturb. 10%	Perturb. 20%
6	48.95775	244.7894	489.5787	979.1575
7	25.64560	128.2280	256.4565	512.9128
8	23.80872	119.0435	238.0871	476.1741
9	21.52502	107.6257	215.2516	430.5029
10	13.58460 *	67.92264 *	135.8453 *	271.6906 *
11	14.23434	71.17225	142.3444	284.6888
12	28.19524	140.9768	281.9535	563.9070
M	Perturb. 30%	Perturb. 40%	Perturb. 50%	Perturb. 60%
6	1468.736	1958.315	2447.893	2937.472
7	769.3691	1025.826	1282.282	1538.739
8	714.2612	952.3481	1190.435	1428.522
9	645.7545	861.0059	1076.257	1291.509
10	407.5360 *	543.3813 *	679.2265 *	815.0718 *
11	427.0333	569.3773	711.7219	854.0664
12	845.8605	1127.814	1409.767	1691.721
M	Perturb. 70%	Perturb. 80%	Perturb. 90%	Perturb. 100%
6	3427.051	3916.630	4406.208	4895.787
7	1795.195	2051.651	2308.108	2504.564
8	1666.609	1904.696	2142.783	2380.870
9	1506.760	1722.012	1937.263	2152.515
10	950.9170 *	1086.762 *	1222.608 *	1358.453 *
11	996.4107	1138.755	1281.099	1423.444
12	1973.674	2255.627	2537.581	2819.534

* Quadrática ajustada não convexa

TABELA 4.3.c - Distância suprema entre as hessianas da quadrática ajustada e da função original

Função original: $f(x) = 2x_1^2 + x_2^2 + x_1x_2 + 2x_1$

Ponto dado: (1, 2)

$\Delta = 0.01$

MODO 1				
M	Perturb. 1%	Perturb. 5%	Perturb. 10%	Perturb. 20%
6	90998.47 *	454991.4 *	909982.9 *	1819965. *
7	3015.597 *	15077.99 *	30155.96 *	60311.92 *
8	789.1421 *	3945.728 *	7891.463 *	15782.92 *
9	738.2451 *	3691.266 *	7382.547 *	14765.09 *
10	771.2719 *	3856.395 *	7712.794 *	15425.58 *
11	1315.253 *	6576.285 *	13152.57 *	26305.14 *
12	1223.563 *	6117.848 *	12235.70 *	24471.41 *
M	Perturb. 30%	Perturb. 40%	Perturb. 50%	Perturb. 60%
6	2729948. *	3639931. *	4549914. *	5459897. *
7	90467.88 *	120623.8 *	150779.8 *	180935.7 *
8	23674.38 *	31565.83 *	39457.30 *	47348.76 *
9	22147.63 *	29530.17 *	36912.72 *	44295.26 *
10	23138.37 *	30851.16 *	38563.95 *	46276.74 *
11	39457.70 *	52610.28 *	65762.85 *	78915.42 *
12	36707.12 *	48942.82 *	61178.53 *	73414.22 *
M	Perturb. 70%	Perturb. 80%	Perturb. 90%	Perturb. 100%
6	6369879. *	7279862. *	8189845. *	9099827. *
7	211091.7 *	241247.7 *	271403.6 *	301559.6 *
8	55240.23 *	63131.68 *	71023.14 *	78914.59 *
9	51677.81 *	59060.35 *	66442.89 *	73825.43 *
10	53989.53 *	61702.32 *	69415.11 *	77127.90 *
11	92067.99 *	105220.6 *	118373.1 *	131525.7 *
12	85649.92 *	97885.65 *	110121.3 *	122357.0 *
MODO 2				
M	Perturb. 1%	Perturb. 5%	Perturb. 10%	Perturb. 20%
6	4708.480	23542.41	47084.85	94169.68
7	2471.556	12357.78	24715.62	49431.21
8	2285.131	11425.66	22851.31	45702.59
9	2099.691	10498.45	20996.90	41993.79
10	1339.984 *	6699.897 *	13399.79 *	26799.60 *
11	1284.342	6421.668	12843.33	25686.68
12	2651.303	13256.45	26512.89	53025.77
M	Perturb. 30%	Perturb. 40%	Perturb. 50%	Perturb. 60%
6	141254.5	188339.4	235424.2	282509.1
7	74146.83	98862.45	123578.0	148293.7
8	68553.91	91405.21	114256.5	137107.8
9	62990.72	83987.62	104984.5	125981.4
10	40199.38 *	53599.19 *	66998.98 *	80398.80 *
11	38530.04	51373.38	64216.73	77060.06
12	79538.68	106051.6	132564.4	159077.3
M	Perturb. 70%	Perturb. 80%	Perturb. 90%	Perturb. 100%
6	329593.9	376678.7	423763.6	470848.4
7	173909.3	197724.9	222440.5	247156.1
8	159959.1	182810.4	205661.7	228513.0
9	146978.3	167975.3	188972.2	209969.0
10	93798.56 *	107198.4 *	120598.2 *	133998.0 *
11	89903.42	102746.8	115590.1	128433.5
12	185590.2	212103.1	238616.0	265128.8

* Quadrática ajustada não convexa

TABELA 4.3.d - Distância suprema entre as hessianas da quadrática ajustada e da função original

Função original: $f(x) = 2x_1^2 + x_2^2 + x_1x_2 + 2x_1$

Ponto dado: (1,2)

$\Delta = 0.001$

MODO 1				
M	Perturb. 1%	Perturb. 5%	Perturb. 10%	Perturb. 20%
6	768422.5 *	3842114. *	7684233. *	0.1536846E+08 *
7	340453.9 *	1702271. *	3404543. *	6809084. *
8	74019.14 *	370100.5 *	740201.6 *	1480402. *
9	91013.92 *	455069.6 *	910140.7 *	1820281. *
10	90479.61 *	452402.7 *	904805.3 *	1809611. *
11	130817.8 *	654091.5 *	1308184. *	2616368. *
12	90364.25 *	451822.0 *	903643.8 *	1807288. *
M	Perturb. 30%	Perturb. 40%	Perturb. 50%	Perturb. 60%
6	0.2305269E+08 *	0.3073692E+08 *	0.3842115E+08 *	0.4610538E+08 *
7	0.1021363E+08 *	0.1361817E+08 *	0.1702271E+08 *	0.2042725E+08 *
8	2220604. *	2960804. *	3701006. *	4441207. *
9	2730422. *	3640562. *	4550702. *	5460843. *
10	2714417. *	3619223. *	4524029. *	5428835. *
11	3924552. *	5232736. *	6540920. *	7849104. *
12	2710932. *	3614576. *	4518220. *	5421864. *
M	Perturb. 70%	Perturb. 80%	Perturb. 90%	Perturb. 100%
6	0.5378961E+08 *	0.6147384E+08 *	0.6915807E+08 *	0.7684230E+08 *
7	0.2383179E+08 *	0.2723634E+08 *	0.3064088E+08 *	0.3404542E+08 *
8	5181407. *	5921609. *	6661810. *	7402011. *
9	6370983. *	7281124. *	8191263. *	9101404. *
10	6333639. *	7238446. *	8143250. *	9048058. *
11	9157288. *	0.1046547E08 *	0.1177366E+08 *	0.1308184E+08 *
12	6325508. *	7229152. *	8132796. *	9036440. *
MODO 2				
M	Perturb. 1%	Perturb. 5%	Perturb. 10%	Perturb. 20%
6	227124.7 *†	1135624. *†	2271249. *†	4542497. *†
7	302135.7	1510679.	3021359.	6042717.
8	260490.6	1302463.	2604924.	5209849.
9	87213.37 *	436065.2 *	872129.4 *	1744260. *
10	118861.8 *	594311.8 *	1188624. *	2377247. *
11	150943.3	754723.9	1509448.	3018894.
12	222270.7	1111359.	2222718.	4445437.
M	Perturb. 30%	Perturb. 40%	Perturb. 50%	Perturb. 60%
6	6813746. *†	9084994. *†	0.1135624E+08 *†	0.1362749E+08 *†
7	9064076.	0.1208543E+08	0.1510679E+08	0.1812815E+08
8	7814774.	0.1041970E+08	0.1302462E+08	0.1562955E+08
9	2616390. *	3488518. *	4360648. *	5232778. *
10	3565871. *	4754494. *	5943120. *	7131743. *
11	4528342.	6037790.	7547236.	9056685.
12	6608156.	8890875.	0.1111359E+08	0.1333631E+08
M	Perturb. 70%	Perturb. 80%	Perturb. 90%	Perturb. 100%
6	0.1589874E+08 *†	0.1816999E+08 *†	0.2044124E+08 *†	0.2271249E+08 *†
7	0.2114951E+08	0.2417087E+08	0.2719223E+08	0.3021359E+08
8	0.1823447E+08	0.2083940E+08	0.2344432E+08	0.2604925E+08
9	6104910. *	6977037. *	7849168. *	8721298. *
10	8320366. *	9508990. *	0.1069761E+08 *	0.1188624E+08 *
11	0.1056613E+08	0.1207558E+08	0.1358502E+08	0.1509447E+08
12	0.1555903E+08	0.1778175E+08	0.2000447E+08	0.2222719E+08

* Quadrática ajustada não convexa

† Matriz do sistema de equações mal condicionada

TABELA 4.4.a - Distância suprema entre as hessianas da quadrática ajustada e da função original

Função original: $f(x) = 2x_1^2 + x_2^2 + x_1x_2 + 2x_1$

Ponto dado: (0.2, 0.3)

$\Delta = 1.0$

MODO 1				
M	Perturb. 1%	Perturb. 5%	Perturb. 10%	Perturb. 20%
6	0.2499245	1.249601	2.499196	4.998393 *
7	0.6564707E-01	0.3282354	0.6564711	1.312942
8	0.8184582E-01	0.4092295	0.8184593	1.636919
9	0.8435816E-01	0.4217903	0.8435809	1.687162
10	0.8203030E-01	0.4101520	0.8203044	1.640609
11	0.7879487E-01	0.3939744	0.7879492	1.575898
12	0.7170773E-01	0.3585383	0.7170768	1.434154
M	Perturb. 30%	Perturb. 40%	Perturb. 50%	Perturb. 60%
6	7.497589 *	9.996789 *	12.49598 *	14.99517 *
7	1.969413	2.025884	3.282355	3.938826 *
8	2.455378	3.273837	4.092297 *	4.910756 *
9	2.530742	3.374323	4.217904 *	5.061484 *
10	2.460913	3.281218	4.101522 *	4.921827 *
11	2.363847	3.151796 *	3.939745 *	4.727694 *
12	2.151231	2.868308	3.585384 *	4.302461 *
M	Perturb. 70%	Perturb. 80%	Perturb. 90%	Perturb. 100%
6	17.49437 *	19.99357 *	22.49277 *	24.99196 *
7	4.595297 *	5.251768 *	5.908239 *	6.564711 *
8	5.729216 *	6.547675 *	7.366134 *	8.184594 *
9	5.905066 *	6.748647 *	7.592228 *	8.435808 *
10	5.742131 *	6.562436 *	7.382740 *	8.203045 *
11	5.515643 *	6.303592 *	7.091541 *	7.879491 *
12	5.019538 *	5.736615 *	6.453692 *	7.170769 *
MODO 2				
M	Perturb. 1%	Perturb. 5%	Perturb. 10%	Perturb. 20%
6	0.1672589	0.8362932	1.672586	3.345171
7	0.1556526	0.7782630	1.556526	3.113053
8	0.1553787	0.7768936	1.553787	3.107574
9	0.1199840	0.5909202	1.199840	2.399680
10	0.1072747	0.5363731	1.072746	2.145492
11	0.1204409	0.6022020	1.204404	2.408809
12	0.1509286	0.7546443	1.509288	3.018575
M	Perturb. 30%	Perturb. 40%	Perturb. 50%	Perturb. 60%
6	5.017757	6.690343	8.362929	10.03551
7	4.669579	6.226104	7.782631	9.339157
8	4.661361	6.215148	7.768935	9.322723
9	3.599521	4.799361	5.999202	7.199042
10	3.218238	4.290984	5.363729	6.436476
11	3.613213	4.817617	6.022021	7.226425
12	4.527864	6.037151	7.546438	9.055727
M	Perturb. 70%	Perturb. 80%	Perturb. 90%	Perturb. 100%
6	11.70810	13.38069	15.05327	16.72586
7	10.89568	12.45221	14.00874	15.56526
8	10.87651	12.43030	13.98408	15.53787
9	8.398883	9.598724	10.79856	11.99840
10	7.509222	8.581968	9.654714	10.72746
11	8.430830	9.635234	10.83964	12.04404
12	10.56501	12.07430	13.58359	15.09288

* Quadrática ajustada não convexa

TABELA 4.4.b - Distância suprema entre as hessianas da quadrática ajustada e da função original

Função original: $f(x) = 2x_1^2 + x_2^2 + x_1x_2 + 2x_1$

Ponto dado: (0.2, 0.3)

$\Delta = 0.1$

MODO 1				
M	Perturb. 1%	Perturb. 5%	Perturb. 10%	Perturb. 20%
6	51.57254 *	257.8629 *	515.7258 *	1031.451 *
7	1.492272	7.461364 *	14.92274 *	29.84547 *
8	1.004790	5.023940 *	10.04788 *	20.09575 *
9	1.000712	5.003551 *	10.00710 *	20.01419 *
10	0.9556509	4.778248 *	9.556499 *	19.11299 *
11	0.9238388	4.619190 *	9.238377 *	18.47676 *
12	0.8558299	4.279141 *	8.558289 *	17.11658 *
M	Perturb. 30%	Perturb. 40%	Perturb. 50%	Perturb. 60%
6	1547.177 *	2062.903 *	2578.629 *	3094.354 *
7	44.76821 *	59.69094 *	74.61368 *	89.53641 *
8	30.14362 *	40.19150 *	50.23937 *	60.28725 *
9	30.02128 *	40.02837 *	50.03546 *	60.04256 *
10	28.66949 *	38.22599 *	47.78248 *	57.33897 *
11	27.71514 *	36.95352 *	46.19190 *	55.43028 *
12	25.67486 *	34.23315 *	42.79145 *	51.34973 *
M	Perturb. 70%	Perturb. 80%	Perturb. 90%	Perturb. 100%
6	3610.080 *	4125.806 *	4641.531 *	5157.257 *
7	104.4591 *	119.3819 *	134.3046 *	149.2274 *
8	70.33512 *	80.38300 *	90.43087 *	100.4787 *
9	70.04965 *	80.05675 *	90.06384 *	100.0709 *
10	66.89547 *	76.45197 *	86.00846 *	95.56496 *
11	64.66865 *	73.90703 *	83.14541 *	92.38380 *
12	59.90802 *	68.46632 *	77.02461 *	85.58289 *
MODO 2				
M	Perturb. 1%	Perturb. 5%	Perturb. 10%	Perturb. 20%
6	3.301297	16.50643	33.01287	66.02573
7	2.066273	10.33138	20.66276	41.32551
8	2.044938	10.22472	20.44945	40.89889
9	1.381790	6.908941	13.81790	27.63576
10	0.8497706 *	4.248854 *	8.497703 *	16.99542 *
11	1.584104	7.920580	15.84118	31.68235
12	2.605433	13.02718	26.05438	52.10874
M	Perturb. 30%	Perturb. 40%	Perturb. 50%	Perturb. 60%
6	99.03859	132.0514	165.0643	198.0772
7	61.98826	82.65101	103.3137	123.9765
8	61.34835	81.79778	102.2472	122.6967
9	41.45364	55.27152	69.08939	82.90727
10	25.49312 *	33.99082 *	42.48854 *	50.98625 *
11	47.52352	63.36409	79.20587	95.04704
12	78.16311	104.2175	130.2719	156.3262
M	Perturb. 70%	Perturb. 80%	Perturb. 90%	Perturb. 100%
6	231.0900	264.1629	297.1157	330.1286
7	144.6393	165.3020	185.9647	206.6275
8	143.1461	163.5956	184.0450	204.4945
9	96.72515	110.5430	124.3609	138.1788
10	59.48395 *	67.98167 *	76.47937 *	84.97707 *
11	110.8882	126.7294	142.5706	158.4117
12	182.3806	208.4349	234.4893	260.5437

* Quadrática ajustada não convexa

TABELA 4.4.c - Distância suprema entre as hessianas da quadrática ajustada e da função original

Função original: $f(x) = 2x_1^2 + x_2^2 + x_1x_2 + 2x_1$

Ponto dado: (0.2, 0.3)

$\Delta = 0.01$

MODO 1				
M	Perturb. 1%	Perturb. 5%	Perturb. 10%	Perturb. 20%
6	5836.711 *	29183.59 *	58367.15 *	116734.3 *
7	185.5712 *	927.8550 *	1855.710 *	3711.419 *
8	49.03991 *	245.2008 *	490.4018 *	980.8025 *
9	45.95944 *	229.7965 *	459.5930 *	919.1855 *
10	48.36144 *	241.8065 *	483.6130 *	967.2254 *
11	83.25385 *	416.2691 *	832.5387 *	1665.076 *
12	77.55703 *	387.7849 *	775.5699 *	1551.139 *
M	Perturb. 30%	Perturb. 40%	Perturb. 50%	Perturb. 60%
6	175101.5 *	233468.7 *	291835.9 *	350203.0 *
7	5567.129 *	7422.839 *	9278.549 *	11134.26 *
8	1471.204 *	1961.605 *	2452.006 *	2942.408 *
9	1378.778 *	1838.371 *	2297.964 *	2757.557 *
10	1450.837 *	1934.450 *	2418.063 *	2901.676 *
11	2497.614 *	3330.153 *	4162.690 *	4995.220 *
12	2326.709 *	3102.279 *	3877.848 *	4653.419 *
M	Perturb. 70%	Perturb. 80%	Perturb. 90%	Perturb. 100%
6	408570.2 *	466937.4 *	525304.5 *	583671.7 *
7	12989.97 *	14845.68 *	16701.39 *	18557.10 *
8	3432.809 *	3923.211 *	4413.611 *	4904.013 *
9	3217.150 *	3676.742 *	4136.335 *	4595.928 *
10	3385.288 *	3868.900 *	4352.513 *	4836.125 *
11	5827.767 *	6660.305 *	7492.843 *	8325.381 *
12	5428.988 *	6204.558 *	6980.127 *	7755.697 *
MODO 2				
M	Perturb. 1%	Perturb. 5%	Perturb. 10%	Perturb. 20%
6	289.9108	1494.551	2989.103	5978.205
7	155.6103	778.0512	1556.102	3112.204
8	143.9593	719.7929	1439.585	2879.169
9	130.0111	650.0526	1300.104	2600.208
10	84.58739 *	422.9369 *	845.8739 *	1691.747 *
11	86.96785	434.8444	869.6882	1739.378
12	173.0102	865.0567	1730.114	3460.228
M	Perturb. 30%	Perturb. 40%	Perturb. 50%	Perturb. 60%
6	8967.308	11956.41	14945.51	17934.61
7	4668.306	6224.407	7780.509	9336.610
8	4318.754	5758.338	7197.923	8637.508
9	3900.313	5200.415	6500.520	7800.623
10	2537.621 *	3383.495 *	4229.368 *	5075.242 *
11	2609.066	3478.755	4348.444	5218.134
12	5190.342	6920.456	8650.570	10380.68
M	Perturb. 70%	Perturb. 80%	Perturb. 90%	Perturb. 100%
6	20923.72	23912.82	26901.92	29891.02
7	10892.71	12448.81	14004.92	15561.02
8	10077.09	11516.68	12956.26	14395.85
9	9100.726	10400.83	11700.93	13001.04
10	5921.116 *	6766.990 *	7612.864 *	8458.738 *
11	6087.821	6957.510	7827.198	8696.888
12	12110.80	13840.91	15571.03	17301.14

* Quadrática ajustada não convexa

4.3 Análise das tabelas

O principal a ser destacado é o aparecimento de várias experiências que resultaram no ajuste de uma quadrática *não convexa*. Isto ocorre sem um critério bem definido, sendo que estes resultados podem ser observados em quase todas as tabelas apresentadas.

Além disto, dependendo do *ponto dado* considerado, não existe nenhuma proximidade entre a quadrática ajustada e a quadrática perturbada original, mesmo quando o grau de perturbação é pequeno (1%). Esta falta de proximidade pode ser verificada mesmo quando a quadrática ajustada é convexa. Conforme o grau de perturbação aumenta, pior se torna o ajuste. Podemos observar que esta piora é diretamente proporcional ao grau de perturbação aplicado à quadrática, independentemente dos outros parâmetros em questão.

De maneira geral, o **Modo 2** de geração dos pontos é melhor que o **Modo 1**, com a malha de dados exata. Se for acrescentado um ponto a esta malha, vemos que somente o ajuste com o **Modo 1** melhora razoavelmente, sendo que a qualidade do mesmo, em termos de proximidade entre as quadráticas, se aproxima da qualidade do ajuste com o **Modo 2** e malha exata. Acrescentando mais pontos, o ajuste se mantém estável, podendo eventualmente ocorrer ajustes de quadráticas não convexas.

Um resultado importante é que, quanto mais próximos estão os pontos da malha entre si, pior é o ajuste. Quando a distância entre os pontos é muito pequena em relação à norma suprema do ponto que dá origem à malha, a matriz que dá origem ao sistema de equações lineares é mal condicionada, e conseqüentemente o ajuste não é confiável. Já com os pontos mais distantes entre si, o ajuste é um pouco melhor, embora não exista proximidade entre as quadráticas.

4.4 Conclusão

O ajuste segundo a proposta de [6] não é confiável quando o mesmo é feito através de experiências numéricas simulando experimentos práticos observáveis, uma vez que foram constatados vários casos em que foram aproximadas quadráticas não convexas, embora a quadrática original fosse estritamente convexa.

Além disto, não existe nenhuma garantia da proximidade entre as quadráticas. Em particular, se os pontos da malha estão muito próximos

uns dos outros, a qualidade do ajuste é muito ruim.

Constatamos também que quanto maior é o grau de perturbação aplicado á quadrática, pior é o ajuste. Isto nos leva à hipótese de que quanto mais a função original se distancia de uma quadrática, menos confiável é o ajuste.

Capítulo 5

Experiências numéricas com funções não quadráticas

5.1 Introdução

No capítulo anterior foram realizadas experiências numéricas com funções quadráticas convexas perturbadas, de modo a obter uma aproximação ao que ocorre na prática, quando a avaliação da função nos pontos usados no ajuste é obtida através de realização de experimentos reais observáveis. Tendo em vista que, nestas experiências, os piores resultados ocorrem quando a função original usada nos testes está longe de ser uma quadrática (quadrática com alto grau de perturbação), e sendo que este tipo de função retrata muito bem o que ocorre na prática, mostramos neste capítulo as experiências numéricas realizadas com funções teste não quadráticas.

As experiências foram realizadas de maneira exaustiva, de modo a mostrar o comportamento do ajuste a um modelo quadrático com este tipo de função. Foram levados em consideração diferentes parâmetros, vistos a seguir.

5.2 Experiências numéricas realizadas

De modo similar às experiências numéricas mostradas nos capítulos anteriores, nestas experiências foi usado o modelo quadrático descrito no item 3.2.

O ajuste dos pontos pertencentes a uma malha de dados a este modelo foi feito variando-se os seguintes parâmetros:

1. O modo de obtenção dos pontos da malha de dados (descrito anteriormente no item 3.3);
2. A proximidade entre os pontos da malha (Δ);
3. O número de pontos pertencentes à malha de dados (M).

O número de pontos da malha foi incrementado em cada ajuste, na esperança de se obter, com isso, um ajuste melhor.

As seguintes funções originais foram usadas nas experiências:

1. Função Quártica de Powell [8]:

$$f(x) = (x_1 + 10x_2)^2 + 5(x_3 - x_4)^2 + (x_2 - 2x_3)^4 + 10(x_1 - x_4)^4$$
2. Função de Rosenbrock [8]:

$$f(x) = 100(x_2 - x_1^2)^2 + (1 - x_1)^2$$
3. $f(x) = (x_1 - 1)^4 + (x_2 - 1)^4$

A função 1 é convexa não estrita, a função 2 é não convexa e a função 3 é estritamente convexa.

Para cada uma das funções acima, foram realizados ajustes com malhas de dados geradas a partir de diferentes *pontos dados*, conforme pode ser visto nas tabelas a seguir. De maneira análoga aos capítulos anteriores, a escolha destes pontos foi feita de maneira aleatória.

A qualidade do ajuste foi avaliada através dos seguintes critérios:

- Pela distância suprema entre a hessiana da quadrática ajustada e a hessiana analítica da função original avaliada no *ponto dado*;
- Pela convexidade da função quadrática ajustada, verificada através dos autovalores de sua matriz hessiana.

As tabelas a seguir mostram os resultados obtidos.

TABELA 5.1.a - Distância suprema entre as hessianas da quadrática ajustada e da função original

Função original: Quártica de Powell

Ponto dado: $(-4, 2, -1, 3)$

MODO 1				
M	$\Delta = 1$	$\Delta = 0.1$	$\Delta = 0.01$	$\Delta = 0.001$
15	3155.214 *	291.1748 *	154.6960 *	6822.525 *†
16	1794.716 *	172.8896 *	49.10956 *	5364.596 *†
17	1438.723 *	140.3027 *	160.8972	5354.013 *†
18	1337.967 *	131.7966 *	81.43167 *	15113.79 *†
19	1248.097 *	124.7904	140.5134	6082.160 *†
20	1251.258 *	123.3450	240.7766	3484.949 *†
21	1064.785 *	103.1691	47.70789	4637.240 *†
22	1069.311	103.4168	51.74567	4445.714 *†
23	1097.957	106.7970	46.44599	2603.077 *†
24	959.8478	93.89892	41.32316 *	4547.660 *†
25	660.0049	64.55992	53.99179	4551.279 *†
26	661.5182	64.94040	70.12634	4693.291 *†
27	665.0142	64.98817	60.30713	3057.378 *†
28	672.4247	66.14554	37.12842 *	6730.260 *†
29	647.3446	63.21704	6.940430	5255.542 *†
30	648.6400	63.25390	16.09216	4511.398 *†
MODO 2				
M	$\Delta = 1$	$\Delta = 0.1$	$\Delta = 0.01$	$\Delta = 0.001$
15	874.9777 *	86.75946 *	63.32751	5166.506 *†
16	869.7071 *	86.81445 *	185.1542 *	5940.449 *†
17	784.0185 *	82.90466 *	112.0928	6355.227 *†
18	826.0017	80.17181	125.6854 *	8921.333 *†
19	813.9503	77.58466	317.7894 *	9038.875 *†
20	793.7335	77.83459	78.33057 *	5516.273 *†
21	788.6818	78.29791	247.3990 *	6907.348 *†
22	787.7236	76.73798	128.2147	8660.381 *†
23	793.4881 *	76.15564	86.18231	10450.88 *†
24	792.6414 *	75.68811	41.23163	16101.27 *†
25	517.4008 *	50.16479	43.82226	5736.888 *†
26	555.4878 *	54.94183	74.55927 *	7899.821 *†
27	563.1275 *	53.69257	91.66827	7286.679 *†
28	561.2050 *	54.61200	80.69946	5195.581 *†
29	590.0434	56.93823	44.33710	4795.820 *†
30	489.5543	47.08752	65.08789	4483.808 *†

* Quadrática ajustada não convexa

† Matriz do sistema de equações mal condicionada

TABELA 5.1.b - Distância suprema entre as hessianas da quadrática ajustada e da função original

Função original: Quártica de Powell

Ponto dado: $(-4, 2, -1, 3)$

MODO 3				
M	$\Delta = 1$	$\Delta = 0.1$	$\Delta = 0.01$	$\Delta = 0.001$
15	1411.951 *	146.1417 *	630.8105 *	9285.598 *†
16	1176.637 *	116.2013 *	377.5980 *	7547.928 *†
17	1121.720 *	114.0857 *	123.9700 *	6769.835 *†
18	371.1893 *	44.93185 *	269.0675 *	6419.237 *†
19	398.8536 *	40.98320 *	290.7055 *	8103.154 *†
20	419.4845 *	38.62605 *	113.5725 *	6691.616 *†
21	590.6347 *	58.69743 *	70.02049 *	7927.075 *†
22	583.1754 *	60.20705 *	128.3874 *	6382.434 *†
23	328.4801 *	34.72253 *	178.1365 *	4108.031 *†
24	327.2403 *	34.06471 *	284.1114 *	4862.957 *†
25	337.7368 *	32.98035 *	91.60968 *	4813.681 *†
26	255.1422 *	26.64314 *	129.5690 *	6592.650 *†
27	367.7159 *	35.15967 *	63.05481 *	6298.778 *†
28	138.6899 *	14.77568 *	51.89749 *	6248.745 *†
29	110.4395 *	11.56219 *	140.9351 *	4843.626 *†
30	117.9212 *	12.78777 *	75.72939 *	7135.651 *†
MODO 4				
M	$\Delta = 1$	$\Delta = 0.1$	$\Delta = 0.01$	$\Delta = 0.001$
15	262.5350 *	26.69715 *	1262.449 *	2838.752 *†
16	319.1044 *	34.85382 *	1541.465 *	3710.179 *†
17	232.8757 *	28.01337 *	871.4627 *	4749.190 *†
18	189.6645 *	22.71448 *	803.0470 *	3380.254 *†
19	216.4789 *	24.25244 *	443.5147 *	6383.762 *†
20	189.2684 *	21.09070 *	79.48177 *	4955.588 *†
21	183.5431 *	19.73303 *	723.1651 *	5111.960 *†
22	183.1819 *	18.38580 *	547.6452 *	3473.747 *†
23	192.0016 *	19.10899 *	421.7189 *	5190.526 *†
24	242.7389 *	22.39581 *	967.8932 *	7656.244 *†
25	202.5993 *	20.35473 *	531.3091 *	4572.343 *†
26	196.1541 *	18.11431 *	104.8123 *	4297.962 *†
27	213.6213 *	21.25379 *	330.6827 *	3692.231 *†
28	176.1568 *	17.70154 *	227.0460 *	4053.975 *†
29	189.8030 *	17.70831 *	95.87337 *	4263.122 *†
30	184.9923 *	17.77423 *	68.47992 *	5595.107 *†

* Quadrática ajustada não convexa

† Matriz do sistema de equações mal condicionada

TABELA 5.2.a - Distância suprema entre as hessianas da quadrática ajustada e da função original

Função original: Quártica de Powell

Ponto dado: $(3, -1, 0, 1)$

MODO 1				
M	$\Delta = 1$	$\Delta = 0.1$	$\Delta = 0.01$	$\Delta = 0.001$
15	637.5166 *	81.80184	20.87328	553.7598 *†
16	426.1195 *	48.93096 *	5.365171	199.1358 *†
17	336.5833 *	39.10670	5.126695	158.0837 *†
18	314.1631 *	36.48547	2.280956	119.6961 *
19	286.3338 *	33.84851	2.635410	173.3190 *†
20	296.8672 *	34.22779	1.198410	119.9898 *
21	262.5794 *	29.43159 *	2.422911	139.3816 *
22	263.4644 *	29.55236 *	2.988211	80.97820 *
23	270.8665 *	30.33612 *	1.875336	44.14445 *
24	236.0311 *	26.49375 *	1.986116	173.3136 *†
25	169.0820 *	18.44087 *	1.671667	61.31838
26	169.3572 *	18.46945 *	1.707911	49.67602 *
27	170.2505 *	18.57404 *	1.812902	230.4536 †
28	172.7529 *	18.80536 *	1.542230	177.0598 *†
29	163.7182 *	18.02128 *	1.481174	241.1233 *†
30	164.7096 *	18.06870 *	1.333752	451.2410 *
MODO 2				
M	$\Delta = 1$	$\Delta = 0.1$	$\Delta = 0.01$	$\Delta = 0.001$
15	275.0006 *	24.40172	10.34755 *	105.7703 *†
16	276.3218 *	24.51113	5.459553 *	112.0995 *†
17	269.3875	23.80351	5.170986	79.09986 *
18	229.6884 *	22.28035	4.895527	111.3565 *†
19	229.4768 *	21.99738	6.038082 *	86.10698 *
20	186.1993 *	21.38605 *	6.136822 *	99.69791 *†
21	186.8966 *	21.27025 *	6.181625 *	105.7041 *†
22	188.1810 *	21.31321 *	3.879162	173.1056 *†
23	183.1508 *	21.36261 *	5.461655 *	142.1123 *†
24	182.8347 *	21.34079 *	6.568302 *	70.53033 *†
25	176.3420	15.06662	2.464325	99.02223 *†
26	186.0412	15.97083	3.164734	240.4731 *†
27	165.2547 *	14.98706	3.880623	107.1660 *†
28	163.2435 *	14.99677	4.176220 *	153.7530 *†
29	150.7373 *	15.96131	3.191238	156.5411 *†
30	132.3845 *	13.09735	3.104298	168.6488 *†

* Quadrática ajustada não convexa

† Matriz do sistema de equações mal condicionada

TABELA 5.2.b - Distância suprema entre as hessianas da quadrática ajustada e da função original

Função original: Quártica de Powell

Ponto dado: (3, -1, 0, 1)

MODO 3				
M	$\Delta = 1$	$\Delta = 0.1$	$\Delta = 0.01$	$\Delta = 0.001$
15	358.1132 *	41.20108	12.37652	141.8178 †
16	312.9076 *	33.01545	4.918674	247.7055 †
17	301.0214 *	31.01250	1.471124	165.0994 †
18	111.5215	10.65605	2.938099	163.4718 †
19	119.0007	11.49098	3.245029	169.2195 †
20	123.7053	12.02326	2.506639	162.5676 †
21	181.6379 *	16.92620	3.979481	250.3500 †
22	180.6640 *	16.68154	3.308235	280.6522 †
23	116.0589 *	9.484207	3.011436	177.4577 †
24	114.9525 *	9.447025	2.837933	188.8794 †
25	104.6073 *	9.056965	2.253334	303.8008 †
26	94.4231 *	7.413966	5.647634	226.1081 †
27	86.05056 *	9.944489	2.140060	248.9337 †
28	58.46492 *	3.920586	2.270229	201.5267 †
29	50.16556 *	3.281943	2.790283	199.4394 †
30	53.63538 *	3.443786	1.349537	222.9074 †
MODO 4				
M	$\Delta = 1$	$\Delta = 0.1$	$\Delta = 0.01$	$\Delta = 0.001$
15	90.27474	8.218027	8.295071	248.3491 †
16	92.17871	8.328815	11.03397	166.5713 †
17	75.79927	6.803772	3.060846	324.3392 †
18	61.74995	4.823765	2.094885	96.66814 *
19	75.04982	6.443188	1.124104	203.3380 †
20	66.00822	5.676640	2.787786	202.8836 †
21	64.53490	5.400436	12.88798	175.1603 †
22	64.64342	5.436665	4.204176	283.2800 †
23	73.86934	5.908974	4.330297	201.3101 †
24	83.69900	7.170353	7.502396	232.6071 †
25	72.29836	6.040518	7.975897	195.8827 †
26	71.92426	5.989332	2.488367	439.8146 †
27	75.28279	6.455721	2.336866	260.1388 †
28	63.54407	5.369541	3.667725	309.9991 *
29	69.06886	5.813412	5.470299	310.4200 †
30	67.25705	5.635605	6.542295	425.3220 *

* Quadrática ajustada não convexa

† Matriz do sistema de equações mal condicionada

TABELA 5.3.a - Distância suprema entre as hessianas da quadrática ajustada e da função original

Função original: Quártica de Powell

Ponto dado: (0.5, 0, 1, 0.5)

MODO 1				
M	$\Delta = 1$	$\Delta = 0.1$	$\Delta = 0.01$	$\Delta = 0.001$
15	151.4270 *	11.44455 *	1.659220 *	95.84169 *
16	125.7213 *	11.10553 *	1.425254 *	8.709571
17	118.3985 *	10.91968 *	1.099824 *	6.233125
18	121.7236 *	10.92494 *	1.235593 *	7.903018 *
19	110.9009 *	8.777415 *	0.9476828 *	1.40339
20	120.2911 *	8.555910 *	0.8212118 *	9.652446
21	126.2265 *	8.283779 *	0.9378287 *	7.813072
22	126.2359 *	8.277109 *	0.8178190 *	16.33694
23	125.2359 *	8.219754 *	0.8984213 *	12.55078
24	127.4003 *	8.315423 *	0.8039134 *	13.08574
25	125.9544 *	8.250450 *	0.7895348 *	6.606245
26	123.3654 *	8.266452 *	0.7841121 *	9.952225
27	122.8560 *	8.313302 *	0.8075506 *	3.418313
28	121.6510 *	8.154264 *	0.7608658 *	14.03607
29	121.8577 *	8.114151 *	0.8029366 *	9.052307
30	99.38358 *	6.257680 *	0.6669544 *	4.431002
MODO 2				
M	$\Delta = 1$	$\Delta = 0.1$	$\Delta = 0.01$	$\Delta = 0.001$
15	247.9999	19.76740	1.801331 *	19.99860 *
16	247.0345	19.65592	1.857607 *	9.020889 *
17	246.0574	19.52146	1.895752 *	13.59941 *
18	240.8577	19.18950	1.722225 *	13.27039
19	197.9801	15.76936	1.512781 *	1.708281 *
20	198.6054	15.70050	1.518652 *	5.612402 *
21	189.5791	15.04791	1.505550	15.97807 *
22	189.3539	15.00996	1.455587	2.804434
23	173.0795	13.82300	1.296551 *	1.969536
24	173.0517	13.81659	1.341755	9.312887 *
25	173.2279	13.79607	1.363596	4.668012
26	173.1732	13.80302	1.373131	6.954519
27	173.2277	13.77116	1.365480	8.214277
28	170.2359	13.59770	1.323187	6.498381 *
29	170.4543	13.60543	1.390236	6.862894 *
30	170.4789	13.60916	1.429419	3.298890 *

* Quadrática ajustada não convexa

TABELA 5.3.b - Distância suprema entre as hessianas da quadrática ajustada e da função original

Função original: Quártica de Powell

Ponto dado: (0.5, 0, 1, 0.5)

MODO 3				
M	$\Delta = 1$	$\Delta = 0.1$	$\Delta = 0.01$	$\Delta = 0.001$
15	118.6317 *	9.567013 *	1.622675 *	37.07863
16	105.7967 *	8.927919	0.8659782	13.82731 *
17	102.0584 *	8.759052	0.8933830 *	13.58437 *
18	128.0557 *	10.68643 *	1.049088	36.39601 *
19	128.7356 *	10.73722 *	1.007162 *	20.94514 *
20	128.2947 *	10.70141 *	0.9557457 *	8.888265 *
21	133.5041 *	11.14692 *	1.021946 *	29.99386 *
22	130.8936 *	10.96820 *	1.037855 *	34.11203 *
23	133.7413 *	11.26803 *	1.097052 *	37.97422 *
24	129.7310 *	10.93464 *	1.057283 *	28.07560 *
25	128.0897 *	10.74854 *	1.061726 *	15.84248 *
26	125.5358 *	10.53097 *	0.9821243	10.72295
27	125.3062 *	10.55207 *	0.9791641 *	5.966499
28	124.6991 *	10.54194 *	1.093071 *	21.88761
29	124.1523 *	10.55226 *	0.9827023 *	12.51694
30	125.2639 *	10.61035 *	1.058022 *	10.28923
MODO 4				
M	$\Delta = 1$	$\Delta = 0.1$	$\Delta = 0.01$	$\Delta = 0.001$
15	95.41099 *	8.684656	1.638836	10.19653 *
16	177.5437 *	16.85119	2.571817	54.81413 *
17	133.1600 *	12.52184	1.728233	73.85311 *
18	134.0782 *	12.80112	1.344557	97.64890 *
19	37.98593 *	2.792576	0.4973850	84.01055 *
20	36.13711 *	2.719946	0.3042326	85.70033 *
21	61.55981 *	4.895769	0.5774717	54.02050 *
22	60.55003 *	4.774877	0.5047072	65.66403 *
23	72.72173 *	5.696018	0.6905794	80.28298 *
24	79.90226 *	6.695674 *	0.5647287	65.20145 *
25	63.40434 *	5.113977	0.4961843	44.93101 *
26	63.59216 *	5.084085	0.4670362	54.00016 *
27	61.54721 *	4.922861	0.4980898	65.69133 *
28	63.62849 *	5.300704	0.5331450	32.49063 *
29	63.97887 *	5.356349	0.5348148	30.67619 *
30	65.05506 *	5.432178	0.5587606	51.16431 *

* Quadrática ajustada não convexa

TABELA 5.3 - Distância suprema entre as hessianas da quadrática ajustada e da função original

Função original: Rosenbrock

Ponto dado: (3,0)

MODO 1				
M	$\Delta = 1$	$\Delta = 0.1$	$\Delta = 0.01$	$\Delta = 0.001$
6	8903.294	987.0607	805.0728 *	5558.378 *
7	1258.012	140.6277	38.00171	3141.889
8	237.5123 *	23.99576	42.36735	2028.425
9	230.7411	23.28714	20.59152	2588.157 *
10	210.9435	21.28964	30.74106	3259.205
11	194.1485	19.68297	54.54747	650.8418 *
12	194.5172	19.64177	12.26489	4604.201
MODO 2				
M	$\Delta = 1$	$\Delta = 0.1$	$\Delta = 0.01$	$\Delta = 0.001$
6	3950.008	363.8593	48.54565	5460.126 *†
7	3892.018	358.1986	96.65021 *	5566.265 †
8	3920.135	361.1589	86.88245	5639.417 *†
9	3868.245 *	355.4797	113.9420	10649.67 *†
10	3862.633 *	355.7609	62.85608	5538.800 *†
11	4035.651 *	371.1732	113.4745	5456.601 *†
12	3939.722 *	362.8550	55.39477	5981.818 †
MODO 3				
M	$\Delta = 1$	$\Delta = 0.1$	$\Delta = 0.01$	$\Delta = 0.001$
6	1786.826	171.6768	87.97400	6587.279 *†
7	2179.086	205.0345	115.4695 *	6680.994 *†
8	2441.140	228.5703	123.7933	6271.617 †
9	3479.513	320.5701	77.30453	6185.128 †
10	3460.729	319.1530	87.80643 *	6078.749 †
11	3426.394	315.7896	191.1385 *	6022.136 †
12	3464.747	319.8855	284.6404 *	5665.006 †
MODO 4				
M	$\Delta = 1$	$\Delta = 0.1$	$\Delta = 0.01$	$\Delta = 0.001$
6	1152.127 *	123.5736	103.5510	11258.22 *†
7	1592.137 *	159.5931	162.1450	9642.038
8	496.0657 *	46.88750	31.98137	7537.916 *†
9	1149.143	100.9636	50.14380	4433.039 *†
10	1072.924	93.40967	45.02315	5220.820 *
11	1168.710	102.0253	100.8030	8491.510 *
12	1206.847	105.7813	50.77539	4215.551 †

* Quadrática ajustada não convexa

† Matriz do sistema de equações mal condicionada

TABELA 5.5 - Distância suprema entre as hessianas da quadrática ajustada e da função original

Função original: Rosenbrock

Ponto dado: $(-1.2, 1)$

MODO 1				
M	$\Delta = 1$	$\Delta = 0.1$	$\Delta = 0.01$	$\Delta = 0.001$
6	3777.102 *	282.6541 *	21.64474	991.3969 *
7	551.6775 *	46.60371 *	4.787436	15.73508
8	125.5118	13.22833	1.639526	102.1078
9	51.07330	16.00798	2.261154	98.54867
10	81.70795	18.24577	2.067184	102.1767
11	66.60664	17.78419	1.968704	97.37898
12	67.20375	17.93184	2.144684	174.2117
MODO 2				
M	$\Delta = 1$	$\Delta = 0.1$	$\Delta = 0.01$	$\Delta = 0.001$
6	1090.000 *	140.5067	14.19501	65.03598
7	1085.195 *	136.4610	14.90576	91.39380
8	1087.214 *	139.9883	14.53281	324.1093
9	1076.792 *	138.3992	14.21091	247.5593
10	1076.307 *	138.3055	13.08226	277.4001
11	1107.649 *	143.6704	14.18042	396.6435
12	1106.249 *	142.4281	15.07036	167.1193
MODO 3				
M	$\Delta = 1$	$\Delta = 0.1$	$\Delta = 0.01$	$\Delta = 0.001$
6	849.8316 *	93.91469	6.537781	897.3990 *†
7	954.0151 *	108.1407	10.88187	818.2086 *†
8	1028.715 *	117.6707	14.48032	237.8883 *
9	1239.237 *	151.0537	14.72693	291.5030 *
10	1237.867 *	150.6545	16.22243	65.24236
11	1222.255 *	148.6741	15.50938	61.71484
12	1230.085 *	149.9418	14.93921	137.9135
MODO 4				
M	$\Delta = 1$	$\Delta = 0.1$	$\Delta = 0.01$	$\Delta = 0.001$
6	559.8463	54.25533	1.451132	191.6537 *†
7	779.9007	81.30937	4.459927	620.5267 *
8	65.73158	13.52322	1.327408	208.6634 *†
9	327.4975 *	46.84871	4.981110	191.0701 *†
10	286.7676 *	42.60069	4.895523	235.1502 *
11	324.2520 *	47.06973	5.280441	157.5239 *†
12	337.3815 *	48.65439 *	4.521057	209.3054 *

* Quadrática ajustada não convexa

† Matriz do sistema de equações mal condicionada

TABELA 5.6 - Distância suprema entre as hessianas da quadrática ajustada e da função original

Função original: Rosenbrock

Ponto dado: (2, 4)

MOD0 1				
M	$\Delta = 1$	$\Delta = 0.1$	$\Delta = 0.01$	$\Delta = 0.001$
6	5884.304	687.5255	108.6002 *	318.8576 *†
7	834.1098	98.06573	9.463455	289.4000 *
8	192.3413	19.49353	1.240898 *	613.5516
9	187.9629	19.06470	2.352638	115.7277
10	175.0338	17.68536	3.624908	106.9361
11	163.7812	16.62940	2.915958	307.7917
12	164.2045	16.63656	2.723755	593.0293
MOD0 2				
M	$\Delta = 1$	$\Delta = 0.1$	$\Delta = 0.01$	$\Delta = 0.001$
6	2750.001	243.4418	18.70267 *	389.0307 *†
7	2706.970	239.7956	12.36362 *	750.2547 *†
8	2727.908	241.6006	20.94923 *	1099.513 *†
9	2690.847 *	238.3440	13.53182 *	789.9640 *†
10	2686.686 *	237.9694 *	13.64948 *	1374.771 *†
11	2811.047 *	248.0868	18.61535 *	440.2264 *†
12	2738.288 *	242.0424 *	17.18298 *	755.7422 *†
MOD0 3				
M	$\Delta = 1$	$\Delta = 0.1$	$\Delta = 0.01$	$\Delta = 0.001$
6	1159.034	107.0013	51.37817	2418.801 *†
7	1432.086	130.9743	57.12949	2338.470 †
8	1614.988	147.0357	24.98045	1987.343 †
9	2356.004	208.5633	44.19822	1806.421 *†
10	2342.011	207.4153	30.89822	1281.386 †
11	2319.575	205.5828	30.94186	1393.288 *†
12	2346.933	207.8557	34.75737	1263.594 *†
MOD0 4				
M	$\Delta = 1$	$\Delta = 0.1$	$\Delta = 0.01$	$\Delta = 0.001$
6	744.5630 *	75.77307	15.17588 *	686.1547 †
7	1027.391 *	99.27750	6.133095 *	366.1766 *†
8	362.3011 *	34.06908 *	4.791809	511.5399 *†
9	797.5640 *	65.84985 *	5.226227	180.9419 *†
10	749.1873 *	61.07526 *	19.16223 *	402.6484 *
11	813.2420 *	66.73108 *	7.319031 *	1049.601 *
12	839.1715 *	69.03732 *	12.82994 *	309.2368 *†

* Quadrática ajustada não convexa

† Matriz do sistema de equações mal condicionada

TABELA 5.7 - Distância suprema entre as hessianas da quadrática ajustada e da função original

Função original: $(x_1 - 1)^4 + (x_2 - 1)^4$

Ponto dado: (2, 3)

MODO 1				
M	$\Delta = 1$	$\Delta = 0.1$	$\Delta = 0.01$	$\Delta = 0.001$
6	142.6019	16.45906	4.489145	24.47921 *†
7	5.918405	0.6861544	0.2149463	31.00880 †
8	4.412332	0.5675311	0.1355085	5.069112
9	2.835744	0.4075770	0.5246449E-01	13.66856 *
10	2.540747	0.3799324	0.7382154E-01	8.611451
11	2.326333	0.3282652	0.1348506	10.41242
12	2.205778	0.3096080	0.1265235	14.12625
MODO 2				
M	$\Delta = 1$	$\Delta = 0.1$	$\Delta = 0.01$	$\Delta = 0.001$
6	27.50001	2.433168	0.2926722	27.88170 †
7	27.57574	2.441389	0.7446284	27.64637 †
8	27.35700	2.426029	0.7519121	36.67121 †
9	25.78551	2.303076	1.372404	33.60840 †
10	26.78137	2.371927	0.8290591	35.54209 †
11	26.80606	2.382152	0.6145949	30.23127 †
12	26.79742	2.377353	0.8802276	35.33943 †
MODO 3				
M	$\Delta = 1$	$\Delta = 0.1$	$\Delta = 0.01$	$\Delta = 0.001$
6	17.77286	1.626511	1.215464	28.98077 †
7	17.51365	1.602608	0.4172754	30.36928 †
8	17.27845	1.597331	0.2113860	29.52330 †
9	17.17534	1.594482	0.2796483	25.42702 †
10	17.02836	1.570889	1.648574	27.41727 †
11	16.94340	1.553702	2.585211	26.46449 †
12	17.08074	1.550126	0.1447558	28.91602 †
MODO 4				
M	$\Delta = 1$	$\Delta = 0.1$	$\Delta = 0.01$	$\Delta = 0.001$
6	23.91377 *	2.431817	0.8124304E-01	31.01601 †
7	18.98232 *	1.893973	0.3972057	23.51123
8	6.057958	0.5152571	0.3881147	33.06254 *
9	7.323313	0.6213538	0.7751578	15.21986
10	5.006747	0.4088864	0.6989680	20.80950
11	4.306856	0.2584993	0.1656629	22.76265 †
12	4.513739	0.2760414	0.3709332	23.02690 †

* Quadrática ajustada não convexa

† Matriz do sistema de equações mal condicionada

TABELA 5.8 - Distância suprema entre as hessianas da quadrática ajustada e da função original

Função original: $(x_1 - 1)^4 + (x_2 - 1)^4$
Ponto dado: (0.5, 0.3)

MODO 1				
M	$\Delta = 1$	$\Delta = 0.1$	$\Delta = 0.01$	$\Delta = 0.001$
6	86.62036 *	6.517149 *	0.6711266	2.791717 *
7	3.331386	0.1898901	0.1838005E-01	0.3985834E-01
8	3.509632	0.2260647	0.2147371E-01	0.7790089E-01
9	2.854613	0.1618170	0.1470089E-01	0.4822856E-01
10	2.820747	0.1563235	0.1402134E-01	0.3774446E-01
11	2.634011	0.13851207	0.1148945E-01	0.1040887
12	2.560786	0.1280547	0.1166439E-01	0.1264247E-01
MODO 2				
M	$\Delta = 1$	$\Delta = 0.1$	$\Delta = 0.01$	$\Delta = 0.001$
6	4.900000	0.8049783	0.8211833E-01	0.4654381E-01
7	4.904404	0.8061634	0.8376455E-01	0.1557738
8	4.869754	0.8011481	0.8391398E-01	0.1688087E-01
9	4.716004	0.7559140	0.7672709E-01	0.3131504
10	4.781249	0.7804320	0.8000493E-01	0.6731260
11	4.778127	0.7811655	0.8042228E-01	0.6824371
12	4.789463	0.7805033	0.8213490E-01	0.4232184
MODO 3				
M	$\Delta = 1$	$\Delta = 0.1$	$\Delta = 0.01$	$\Delta = 0.001$
6	3.957619	0.5450723	0.5157548E-01	0.5420315
7	3.924219	0.5364650	0.5213588E-01	0.2675191E-01
8	3.891918	0.5294995	0.5115849E-01	0.3749964E-01
9	3.887421	0.5483461	0.5746287E-01	0.3599547
10	3.896412	0.5461654	0.5727226E-01	0.5847823
11	3.846204	0.5466448	0.5758557E-01	0.4413123
12	3.849176	0.5515269	0.5761489E-01	0.2886564E-01
MODO 4				
M	$\Delta = 1$	$\Delta = 0.1$	$\Delta = 0.01$	$\Delta = 0.001$
6	9.998572 *	0.9321527	0.1127579	2.386274
7	7.576061	0.7519376	0.7830162E-01	0.1321858
8	1.394106	0.1831587	0.1814594E-01	0.4435015
9	1.188537	0.2302917	0.2192333E-01	0.1837993
10	1.069308	0.1440980	0.1505920E-01	0.8558455E-01
11	1.107866	0.1172628	0.1306987E-01	0.3107680
12	1.047390	0.1249461	0.1405916E-01	0.7468979E-01

* Quadrática ajustada não convexa

TABELA 5.9 - Distância suprema entre as hessianas da quadrática ajustada e da função original

Função original: $(x_1 - 1)^4 + (x_2 - 1)^4$

Ponto dado: (10, 12)

MODO 1				
M	$\Delta = 1$	$\Delta = 0.1$	$\Delta = 0.01$	$\Delta = 0.001$
6	995.8386	60.94887	497.7838	1690.528 *†
7	28.83852	3.461327	99.71662	979.7763 †
8	32.65923	4.376144	52.94916	713.8811 †
9	21.96063	1.953232	68.56299	1049.095 *†
10	21.32924	2.723846	146.8278	948.6814 †
11	17.68834	1.532722	118.3649	712.4773 †
12	16.59045	1.959503	54.44591	631.3883 †
MODO 2				
M	$\Delta = 1$	$\Delta = 0.1$	$\Delta = 0.01$	$\Delta = 0.001$
6	135.4886	14.70787	342.4072	1105.467 *†
7	135.6249	14.14246	203.8127	1106.405 *†
8	134.9273	13.17833	94.11493	856.5033 †
9	126.5884	11.6489	116.9710	1531.307 *†
10	130.8473	12.35767	188.3592	1121.699 *†
11	130.9979	16.28229	228.5957	1080.624 *†
12	130.8011	15.99574	171.5957	778.5525 †
MODO 3				
M	$\Delta = 1$	$\Delta = 0.1$	$\Delta = 0.01$	$\Delta = 0.001$
6	89.69835	12.50455	380.3977	893.1808 *†
7	88.07895	14.44476	327.9607	974.7061 †
8	86.82094	9.694717	172.4163	1106.392 *†
9	107.0250	10.46716	238.5882	1106.693 *†
10	106.5547	11.85970	110.5137	859.7843 †
11	106.4352	14.73489	399.5458	2376.684 *†
12	107.4523	11.35844	778.1816 †	1108.083 †
MODO 4				
M	$\Delta = 1$	$\Delta = 0.1$	$\Delta = 0.01$	$\Delta = 0.001$
6	149.1962	18.88421	893.4624	1429.332 *†
7	124.4817	19.12057	181.2319	852.4401 †
8	33.14273	7.063821	546.6176	899.6023 †
9	41.68740	2.984154	321.3104	1022.899 †
10	30.02353	2.717659	577.6261	621.9850 †
11	27.45618	3.672762	326.3543	984.9555 †
12	28.88073	2.765968	180.2178	1381.676 †

* Quadrática ajustada não convexa

† Matriz do sistema de equações mal condicionada

5.3 Análise das tabelas

Conforme pode ser visto nas tabelas, os piores ajustes foram obtidos quando $\Delta = 1$ ou $\Delta = 0.001$. Isto significa que, quando os pontos estão muito distantes entre si, o ajuste não aproxima uma quadrática com a qualidade desejada. Também, se os pontos estão muito próximos, a qualidade do ajuste é muito ruim, devido, evidentemente, ao mal condicionamento da matriz que dá origem ao sistema de equações lineares.

Os melhores ajustes foram conseguidos quando $\Delta = 0.1$ ou $\Delta = 0.01$. Se levarmos em consideração apenas os ajustes com estes valores de Δ , ainda assim podem ser vistos vários casos de ajustes que aproximaram funções quadráticas *não convexas*.

De um modo geral, o aumento de pontos na malha não melhora o ajuste. Existem casos, inclusive, onde este aumento piora a qualidade do mesmo. Também existem casos nos quais embora a distância suprema diminua quando o número de pontos na malha é aumentado, a função quadrática ajustada é não convexa. Podemos observar ajustes que resultam quadráticas convexas quando a malha de dados contém um certo número de pontos, e no entanto, os ajustes com a mesma malha acrescida de um ponto resultam quadráticas não convexas.

As tabelas também mostram que o modo de obtenção dos pontos da malha de dados não influencia na qualidade do ajuste, já que os mesmos mostram uma certa uniformidade em relação aos quatro modos aqui apresentados.

O principal a ser destacado nestas experiências com funções não quadráticas, é o aparecimento de vários ajustes que resultaram funções quadráticas não convexas, ainda que a função original usada fosse estritamente convexa (função 3). Isto acontece sem um critério bem definido, isto é, independentemente do ponto dado, da distância entre os pontos da malha, e do número de pontos da mesma. Além disto, nos melhores casos, ainda assim, não existe proximidade entre a quadrática ajustada e a função teste original.

5.4 Conclusão

Os ajustes feitos com funções teste não quadráticas (convexas ou não) podem aproximar funções quadráticas não convexas. Isto ocorre sem um critério bem definido, e com uma frequência razoavelmente alta. Além

disto, as distâncias supremas obtidas, nos melhores casos, ainda são grandes, o que mostra a pouca proximidade entre a função teste original e a quadrática ajustada. Se os pontos da malha de dados usada estiverem muito distantes, ou muito próximos entre si, o ajuste, nestes casos, é ainda pior.

Deste modo, concluímos que os ajustes realizados com funções não quadráticas não são confiáveis do ponto de vista da obtenção de uma função quadrática convexa próxima da função original.

Capítulo 6

Conclusões e comentários

As experiências numéricas realizadas mostram de maneira muito evidente dificuldades do tipo:

1. Falta de confiabilidade no ajuste quando os pontos da malha estão muito próximos entre si, devido, evidentemente, ao mal condicionamento da matriz que dá origem ao sistema de equações lineares;
2. Pouca proximidade entre a quadrática ajustada e a função teste original;
3. Casos em que a quadrática ajustada é não convexa, apesar da função teste original ser estritamente convexa.

Das três dificuldades encontradas, a terceira é sem dúvida a mais agravante, uma vez que compromete seriamente a validade da proposta de [6].

Paradoxalmente, no decorrer deste trabalho, tomamos conhecimento da existência de vários artigos, na literatura, onde métodos análogos ao método aqui abordado são propostos e as dificuldades acima não são mencionadas [3,7,12]. Mais do que isto, em [7] é proposto um esquema para “estimar” a hessiana de uma função qualquer, baseado na interpolação de uma quadrática em $q = (n + 1)(n + 2)/2$ pontos, sem a resolução de um sistema linear. Todavia, nossos testes com o modo de obtenção de pontos sugerido segundo o esquema de [7] (vide item 3.3) mostram a aparição de quadráticas não convexas numa frequência muito alta.

Estamos convencidos de que métodos de minimização baseados no ajuste de uma função quadrática usando somente valores da função sofrem sérios defeitos numéricos, devido fundamentalmente à dificuldade 3 acima.

Assim, confiamos que desses “resultados negativos” aqui apresentados surjam fundamentos sólidos para a construção de métodos de otimização “sem derivadas” realmente eficientes.

Bibliografia

- [1] G. E. Forsythe, M. A. Malcom e C. B. Moler : *Computer Methods for Mathematical Computations*, Prentice-Hall, Inc. New Jersey, 1977.
- [2] C. E. Froberg : *Introduction to Numerical Analysis*, Addison-Wesley Publishing Company, Inc. 1969.
- [3] M. Judelman e D. H. Jacobson : *The Effect of Data Grid Size on Certain Interpolation Methods for Unconstrained Function Minimization*, Comp. & Maths. With Appls. 3, 175-182, 1977.
- [4] LABMA Programateca : *Sub-rotina MINOR*, 1980.
- [5] D. G. Luenberger : *Introduction to Linear and Nonlinear Programming*, Adisson-Wesley Publishing Company, Inc. 1973.
- [6] A. A. Mazzoni : *Um Algoritmo para a Otimização da Extração da Sacarose através de um Difusor Contínuo*, Tese de Mestrado, IMECC, UNICAMP, 1982.
- [7] J. A. Nelder e R. Mead : *A Simplex Methods for Function Minimization*, Computer J. 7, 303-310, 1965.
- [8] J. J. Moré, B. S. Garbow e K. E. Hillstrom : *Testing Unconstrained Optimization Software*, ACM Transactions on Maths. Softw. 7, 17-41, 1981.
- [9] NAG Subroutine Library : *Subroutine EIGEN*, 1982.
- [10] B. Noble e J. W. Daniel : *Applied Linear Algebra*, Prentice-Hall, Inc. New Jersey, 1977.
- [11] A. Ralston : *Introduccion al Analisis Numerico*, Editorial Limusa, Wiley S. A. Mexico, 1970.
- [12] D. Winfield : *Function Minimization by Interpolation in a Data Table*, J. Inst. Maths. Appl. 12, 339-347, 1973.